

DIE WOLKE ALS MIKROSTRUKTURIERTES FLUIDES SYSTEM  
EIN MODELL KONVEKTIVER REGENFÄLLE  
UND DEREN PARAMETRISIERUNG  
AUF DER GRUNDLAGE DER THEORETISCHEN WOLKENPHYSIK

INAUGURALDISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

des

Fachbereichs 24 Geowissenschaften

der

Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Jürgen Pankrath

aus Zepernick

1973



DIE WOLKE ALS MIKROSTRUKTURIERTES FLUIDES SYSTEM  
EIN MODELL KONVEKTIVER REGENFALLE  
UND DEREN PARAMETRISIERUNG  
AUF DER GRUNDLAGE DER THEORETISCHEN WOLKENPHYSIK

INAUGURALDISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

des

Fachbereichs 24 Geowissenschaften

der

Freien Universität Berlin

vorgelegt von

Jürgen Pankrath

aus Zepernick



1. Referent : Prof. Dr. H. Fortak
2. Referent : Prof. Dr. K. Hinkelmann

Tag der mündlichen Prüfung : 30. 3. 1973



# INHALTSVERZEICHNIS

|                                                                                     |    |
|-------------------------------------------------------------------------------------|----|
| EINLEITUNG                                                                          | 1  |
| 1. DIE MAKROSTRUKTUR DES FLUIDEN SYSTEMS                                            | 4  |
| 1.1 Die heterogene Mischung aus thermomechanischen, reagierenden fluiden Substanzen | 4  |
| 1.2 Kinematik der heterogenen fluiden Mischung                                      | 5  |
| 1.3 Erhaltungssätze der heterogenen fluiden Mischung                                | 6  |
| 1.3.1 Allgemeine Form der Erhaltungssätze                                           | 6  |
| 1.3.2 Die Massenbilanzgleichung                                                     | 8  |
| 1.3.3 Die Impulsbilanzgleichung                                                     | 9  |
| 1.3.4 Die Energiebilanzgleichung                                                    | 10 |
| 1.3.5 Zusammenstellung der Bilanzgleichungen                                        | 13 |
| 1.4 Die CLAUSIUS-DUHEMsche Entropiegleichung                                        | 17 |
| 1.5 Die Materialgleichungen                                                         | 18 |
| 1.6 Die GIBBSsche Gleichung                                                         | 22 |
| 1.7 Die heterogene und turbulente fluide Mischung                                   | 23 |
| 2. DIE MIKROSTRUKTUR DES FLUIDEN SYSTEMS                                            | 27 |
| 2.1 Die dispersen Partialsubstanzen in der Wolke                                    | 27 |
| 2.2 Das Verhalten des Partikelsystems in einer Wasserwolke                          | 28 |
| 2.2.1 Die Bilanzgleichung der Anzahldichteverteilung                                | 28 |
| 2.2.2 Die gemittelte Bilanzgleichung der Anzahldichteverteilung bei Wolkenturbulenz | 30 |
| 2.3 Das Wachstum der Wolkentropfen                                                  | 31 |
| 2.3.1 Die BRADLEYSche Wachstumsgleichung                                            | 31 |
| 2.3.2 Der Sättigungsdampfdruck an der Oberfläche eines Lösungstropfens              | 34 |
| 2.3.3 Die Temperatur an der Tropfenoberfläche                                       | 39 |
| 2.3.4 Die HOWELLSche Gleichung für das Wachstum von Lösungstropfen                  | 41 |
| 2.4 Koagulation und Zerfall von Wolkentropfen                                       | 41 |
| 2.4.1 Die Koagulations- und Zerfallsgleichung                                       | 41 |
| 2.4.2 Koagulationsprozesse in der Wolke                                             | 43 |
| 2.4.2.1 Die BROWNSche Koagulation                                                   | 43 |
| 2.4.2.2 Die Gravitationskoagulation                                                 | 45 |
| 2.4.2.3 Die turbulente Koagulation                                                  | 47 |
| 2.4.3 Der Tropfenzerfall                                                            | 48 |
| 2.5 Die Fallgeschwindigkeit von Wolkentropfen                                       | 48 |
| 2.5.1 Die Bewegungsgleichung eines Teilchens                                        | 48 |
| 2.5.2 Der fluide Widerstand bei kleinen REYNOLDSschen Zahlen                        | 49 |
| 2.5.3 Der fluide Widerstand bei großen REYNOLDSschen Zahlen                         | 52 |
| 2.6 Erzeugungs- und Übergangsraten des Tropfensystems in der Wolke                  | 52 |

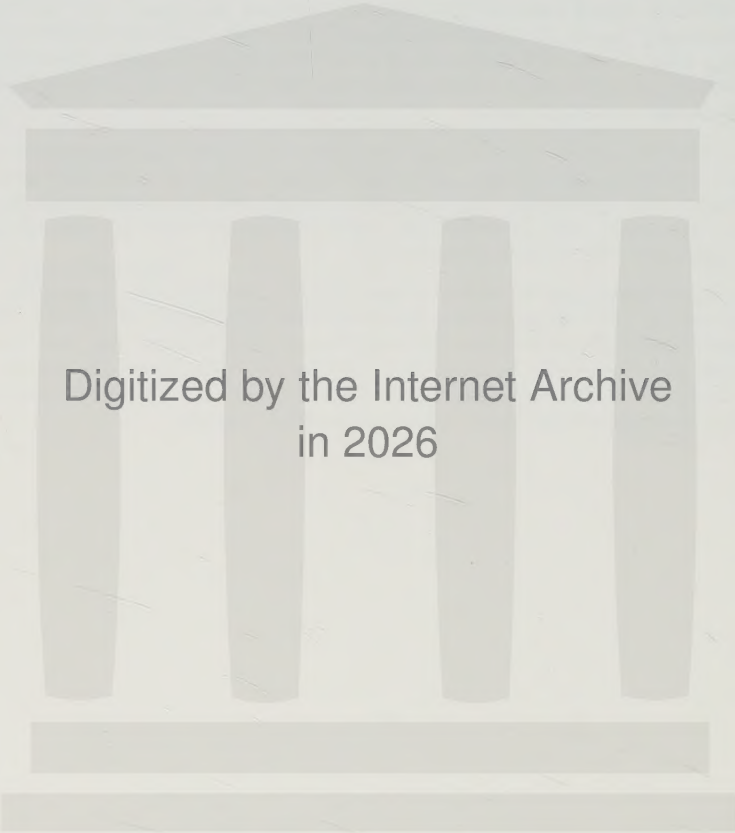
|                                                                                                                            |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.7 Überblick über Veränderungen des Partikelsystems<br>im Verlauf der Wolkenentwicklung                                   | 53 |
| 3. WECHSELWIRKUNG ZWISCHEN MIKRO- UND MAKROSTRUKTUR<br>IM MODELL EINES KONVEKTIVEN REGENFALLS UND IHRE<br>PARAMETRISIERUNG | 56 |
| 3.1 Der Einfluß der Tropfenverteilung auf den Ablauf eines<br>Regenfalls                                                   | 56 |
| 3.2 Bilanzgleichungen für die Feuchtluftmischung                                                                           | 57 |
| 3.3 Modell zur Untersuchung konvektiver Regenfälle                                                                         | 59 |
| 3.4 Ablaufschema der Mikroprozesse im Regenmodell                                                                          | 61 |
| 3.5 Ergebnisse der numerischen Integration                                                                                 | 63 |
| 3.5.1 Einfluß der Mikroprozesse auf die Regenstruktur                                                                      | 63 |
| 3.5.2 Einfluß der Regenstruktur auf die Hydrothermo-<br>dynamik der Atmosphäre im Niederschlagsbereich                     | 64 |
| 3.6 Parametrisierung der Mikrostruktur im konvektiven<br>Regenmodell                                                       | 75 |
| SCHLUSSBEMERKUNG                                                                                                           | 83 |
| LITERATURVERZEICHNIS                                                                                                       | 84 |

## ZUSAMMENFASSUNG

Zur Lösung wolkenphysikalischer Probleme wird das Verhalten von Partikelsystemen in die hydrothermodynamischen Feldgleichungen einbezogen. Zunächst werden heterogene, reagierende fluide Systeme betrachtet und die Erhaltungssätze von Masse, Impuls und Energie für Partialsubstanzen und Mischung formuliert. Thermodynamische Prozesse müssen der CLAUSIUS-DUHEMschen Entropieungleichung genügen, die den Zustandsänderungen gewisse Einschränkungen auferlegt und zur GIBBSschen Gleichung führt. Anschließend werden die Bilanzgleichungen einer HESSELBERG'schen Mittelung unterworfen, so daß eine Beschreibung turbulenter Mischungen möglich wird.

Der Einfluß eines Partikelsystems auf fluide Partialsubstanzen wird für Wasserwolken untersucht, in denen Sinken, Phasenumwandlungen, Koagulationen und Zerfallen der Tropfen sowohl die Partikelverteilung verändern als auch über Erzeugungs- und Übergangsraten in die Bilanzgleichungen der Feuchtluft eingreifen.

Ein eindimensionales numerisches Modell konvektiver Regenfälle zeigt die Anwendung der entwickelten theoretischen Konzepte und macht die Wechselbeziehung zwischen der Mikrostruktur des Regens und der feucht-thermisch geschichteten Atmosphäre im Niederschlagsbereich deutlich. Die Wirkung der Mikrostruktur wird abschließend im gleichen Regenmodell durch geeignete Parametrisierungsansätze ersetzt.



Digitized by the Internet Archive  
in 2026

[https://archive.org/details/IA41543113\\_0064](https://archive.org/details/IA41543113_0064)

## EINLEITUNG

Meteorologie strebt von jeher eine Synopsis, eine Zusammenschau aller Vorgänge an, die sich in der Atmosphäre abspielen. Die numerischen Modelle der allgemeinen atmosphärischen Zirkulation berücksichtigen in zunehmendem Maße physikalische Prozesse, die über Quellfunktionen auf das nichtlineare hydrothermodynamische Gleichungssystem einwirken. Die räumlich-zeitliche Änderung der hydrothermodynamischen Feldgrößen wiederum beeinflusst diese subskaligen Effekte. Von großer Bedeutung für die Energetik der Atmosphäre sind konvektive Wolken, die insbesondere in die Thermodynamik der Atmosphäre, den Wasserkreislauf und die Strahlungsbilanz eingreifen. Die Konvektionswolken dringen als Störungen des hydrothermodynamischen Grundfeldes in die Atmosphäre und durch Umwandlung von Wasserdampf in Wasser oder Eis und von Wasser in Eis wird die entsprechende Phasenumwandlungswärme frei, die die Entwicklung von Wasser-, Eis- oder Mischwolken fördert. Die Wolken erzeugen ein charakteristisches eigenständiges Strömungsfeld innerhalb der Atmosphäre und vergrößern sich solange, bis der erste Niederschlag ausfällt, der die Auflösung der Wolkenzelle ankündigt.

Die Wolken- und Niederschlagsbildung vollzieht sich an der feinverteilten Wasser- oder Eissubstanz und man kann hinsichtlich der Mikrostruktur die Wolkenentwicklung als Umwandlung von Wasserdampf in Wasser an hygroscopischen Aerosolteilchen beschreiben, die im Strömungsfeld zu Wassertropfen heranwachsen und bei starker Abkühlung zu Eisteilchen gefrieren können. Wassertropfen und Eisteilchen sinken bei zunehmender Größe im Feuchtluftstrom und koagulieren miteinander, die Eisteilchen können oberhalb der Gefriertemperatur schmelzen und kleine Tröpfchen abstreifen, die Regentropfen neigen zum Zerfall.

Wolken können demnach als durchströmte offene thermodynamische Systeme angesehen werden, die aus einer heterogenen Mischung aus Luft, Wasserdampf und der nur in polydisperser Partikelverteilung existierenden flüssigen und festen Phase des Wassers bestehen. Die in dieser Mischung stattfindenden Vorgänge bestimmen Struktur und Entwicklung der Wolke.

Im folgenden wird ein Überblick über die Behandlung der Wassersubstanz in den konvektiven Wolkenmodellen gegeben. Die ersten numerischen Modelle der Feuchtkonvektion enthalten Wasser als fluide Substanz, die während thermodynamischer Prozesse in der Wolke immer im Phasengleichgewicht mit dem Wasserdampf bleibt. Den im Verlauf der Wolkenentwicklung erzeugten Wassermassen wird eine von der jeweiligen Masse abhängige Ausfallgeschwindigkeit zugeordnet, so daß aus den Wolken auch Niederschlag ausfallen kann. Der Niederschlag durch eine ungesättigte Atmosphärenschicht führt bei Annahme eines Phasengleichgewichts zu einem Verdampfen der Wassermasse bis zur Sättigung der Atmosphäre, so daß nur sehr geringe Niederschlagsmengen zum Erdboden gelangen. Dadurch wird die mittlere Wasserdampf- und Wärmezufuhr in die Atmosphäre, die von den Konvektionswolken geleistet wird, verfälscht; denn eine Sättigung der Atmosphäre im Niederschlagsbereich der Wolkenzelle entzieht der unteren Atmosphärenschicht die zum Verdampfen des Niederschlags nötige Phasenumwandlungswärme, die der

Wolkenschicht durch Kondensation geliefert wurde. Je geringer also die Niederschlagsmenge relativ zur kondensierten Wasserdampfmenge ist, desto niedriger bleibt die der Atmosphäre im Mittel zugeführte Wärmeenergie.

Um diesen Mangel zu beheben, haben andere Modelle eine Einteilung der Wassersubstanz in Wolkenwasser, das von der Luftströmung in der Wolke mitgeführt wird, und in Regenwasser, das eine Fallgeschwindigkeit besitzt, vorgenommen. Wolkenwasser soll sich bei Überschreiten einer kritischen Menge mit einer bestimmten Rate in Regenwasser umwandeln, welches in Form einer MARSHALL-PALMERSchen Tropfengrößenverteilung vorliegt. Für diese Tropfenverteilung läßt sich eine Verdampfungsrate und eine Einfangrate von Wolkenwasser so formulieren, daß ihre Form beim Ablauf dieser Vorgänge erhalten bleibt. Die Fallgeschwindigkeit der Regenmasse wird durch die Geschwindigkeit der mittleren Tropfenmasse in der Tropfengrößenverteilung ausgedrückt. Die Niederschlagsbildung hängt somit von der Vorgabe einer typischen analytischen Tropfenverteilung und von Modellparametern ab, so daß man durch Variation beider Ansätze Wolken unterschiedlichen Verhaltens modellieren kann.

Realistischere Wolkenmodelle beziehen die Mikrostruktur der Wassersubstanz direkt in das hydrothermodynamische Gleichungssystem ein. Die Mikrostruktur der Wolken kann aus Wolkenkernen, Lösungströpfchen, Wasser- und Regentropfen und /oder aus Gefrierkernen, Eiskristallen, Graupel- und Hagelkörnern bestehen. Die kolloidmeteorologische Forschung hat seit WEGENER [27], SCHMAUSS [22] und FINDEISEN [7] eine Vielzahl detaillierter Kenntnisse aus Labor- und Feldexperimenten über das Verhalten einzelner Hydrometeore gewonnen, die aber noch keinesfalls erschöpft sind. Die Entwicklung geeigneter Wolkenmodelle mit Partikelspektren kann helfen, die Bedeutung einzelner Vorgänge an den verschiedenen Teilchentypen klarzustellen. Man kann versuchen, die Entstehung unterschiedlich strukturierter Wolken durch die Wechselwirkung zwischen Partikelsystem und Feuchtluft modellmäßig nachzuahmen. Außerdem lassen sich durch Veränderung der Teilchenzusammensetzung und -größenverteilung energetische Umlagerungen im Wolkensystem auslösen und damit Richtlinien für die lokale technische Wetterbeeinflussung geben. Obwohl man noch nicht so weit ist, die mikrophysikalischen Prozesse in den Wolken vollständig zu erfassen, soll trotzdem auf eine allgemeine Theorie mikrostrukturierter Wolken hingearbeitet werden, die für Erweiterungen, wie sie zum Beispiel für die Theorie der Gewitterwolken erforderlich werden, offen ist.

Mit der vorliegenden Schrift erfolgt nun der Versuch, die theoretischen Grundlagen für eine systematische Behandlung mikrostrukturierter Wolken zu entwickeln. Auf Anregung von Herrn Prof. Dr. H. FORTAK wird eine Theorie mikrostrukturierter fluider Systeme erarbeitet, die eine Verquickung der hydrothermodynamischen konvektiven Felder mit den ablaufenden mikrophysikalischen Vorgängen ermöglicht. Dazu wird die Theorie der heterogenen, reagierenden fluiden Mischungen herangezogen, die allgemeine Aussagen über das Verhalten der Partialsubstanzen innerhalb der Wolkenmischung macht. Um die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Partialsubstanzen zu bestimmen, wird bei Einschränkung auf eine Wasserwolke das Verhalten

eines polydispersen Tropfensystems in der Feuchtluft untersucht. Dann kann man das vollständige Gleichungssystem zur Beschreibung der mikrostrukturierten Wolkenmischung formulieren. Ein eindimensionales numerisches Modell zur Erfassung der gegenseitigen Beeinflussung von Tropfensystem und Feuchtluft beim Regenfall liefert eine Anwendung dieser Theorie. Hat man den Einfluß vieler fallender Regentropfen auf die Struktur der Atmosphärenschicht im Regenbereich modellmäßig berechnet, dann kann man nach einer einfachen Parametrisierung ausschauen, die in der Lage ist, zumindest ähnliche Wirkungen in der Atmosphäre hervorzurufen.

## 1. DIE MAKROSTRUKTUR DES FLUIDEN SYSTEMS

### 1.1 Die heterogene Mischung aus thermomechanischen, reagierenden fluiden Substanzen.

Wolken sind fluide Mischungen, die aus Feuchtluft und mikrostrukturierten Wasser- und /oder Eissubstanzen bestehen. Die physikalischen Eigenschaften der Wassertropfen- und Eisteilchenverteilungen in der Wolkenluft können nur in Form von statistischen Mittelwerten angegeben werden. Diese Ensemblemittel müssen unter den gleichen makroskopischen Bedingungen über viele verschiedene Realisierungen des dispersen Systems gebildet werden. Man kann jedoch das Ensemblemittel annähernd durch ein Raummittel ersetzen, wenn das Teilchensystem lokale statistische Homogenität in Volumenelementen aufweist, deren charakteristische Längenabmessungen groß gegen den mittleren Teilchenabstand sind und in denen sich die statistischen Eigenschaften des dispersen Systems nur geringfügig ändern. Diese Bedingungen sind in den Wolken erfüllt, so daß man lokale mittlere Teilchenverteilungen definieren kann.

Betrachtet man hydrothermodynamische Vorgänge in den Wolken, die sich über makroskopische charakteristische Längen erstrecken, welche um ein Vielfaches größer sind als die zur Mittelbildung über die Mikrostruktur erforderlichen Längenmaße, dann kann man von der dispersen zur stetigen Beschreibung einer Partikelsubstanz übergehen. Wenn sich die Konfiguration der Teilchenverteilungen durch innere Umstrukturierungen und durch Wechselwirkungen mit den fluiden Partialsubstanzen der Mischung verändert, so muß die Auswirkung der Vorgänge in der Mikrostruktur in Form von Quellfunktionen in den makroskopischen Feldgleichungen der äquivalent fluiden Substanz erscheinen.

Zur Beschreibung von Mischungen wird die Hydrothermodynamik stetiger, heterogener fluider Systeme herangezogen, die das von FICK und STEFAN eingeführte Verfahren der überlagerten Kontinua benutzt. Man faßt die Mischung  $\mathfrak{B}$  als Überlagerung fluider Partialsubstanzen  $\mathfrak{B}_K$  auf, so daß jeder Raum-Zeitpunkt gleichzeitig von jeder Mischungskomponente besetzt ist:

$$\mathfrak{B} = \bigcup_K \mathfrak{B}_K$$

In den fluiden Mischungstheorien, die auf JAUMANN [12] und LOHR [18] zurückgehen, die ECKART [5] und MEIXNER [19] weiterentwickelt und die DE GROOT & MAZUR [2] zusammengefaßt haben, werden die Erhaltungssätze von Masse, Impuls und Energie sowie die GIBBSsche Gleichung für die Gesamtmischung formuliert. Diffusionseffekte sind berücksichtigt, aber es werden für die Partialsubstanzen nur Massenbilanzgleichungen aufgestellt.

Eine strenge Auslegung des Grundkonzeptes stetiger fluider Mischungen hat TRUESDELL [26] vorgenommen, indem er die Erhaltungssätze und die Entropieungleichung für jede fluide Partialsubstanz angibt. Die aus der Überlagerung der Partialsubstanzen entstehenden Bilanzgleichungen der Mischung

werden in Übereinstimmung mit denen einer einfach zusammengesetzten Substanz gebracht, woraus sich gewisse Konsistenzbedingungen ergeben. Weitere Untersuchungen über thermomechanische Mischungen, in denen die diffundierenden Partialsubstanzen auch miteinander reagieren können, stammen von ERINGEN & INGRAM [6] sowie von BOWEN & WIESE [1].

Im folgenden wird zunächst die Theorie der heterogenen fluiden Mischung ausführlich dargelegt und im Verlauf der Arbeit mit einer Mikrostruktur versehen, so daß sie auf offene thermodynamische Systeme wie Wolken und Regen angewendet werden kann.

## 1.2 Kinematik der heterogenen fluiden Mischung

Die Massendichte und die baryzentrische Geschwindigkeit einer fluiden Mischung  $\mathcal{B}$  an einem Raum-Zeitpunkt  $(\mathbf{x}, t)$  setzt sich aus den Dichten  $\rho_K(\mathbf{x}, t)$  und den Geschwindigkeiten  $\mathbf{v}_K(\mathbf{x}, t)$  der Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_K \rho_K(\mathbf{x}, t)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \sum_K \frac{\rho_K(\mathbf{x}, t) \mathbf{v}_K(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}$$

zusammen. Man definiert Massenkonzentration  $c_K(\mathbf{x}, t)$  und Diffusionsgeschwindigkeit  $\mathbf{j}_K(\mathbf{x}, t)$  der Partialsubstanzen durch

$$c_K(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho_K(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}$$

$$\mathbf{j}_K(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}_K(\mathbf{x}, t) - \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$$

und bestätigt

$$\sum_K c_K(\mathbf{x}, t) = 1$$

$$\sum_K \rho_K(\mathbf{x}, t) \mathbf{j}_K(\mathbf{x}, t) = 0$$

Folglich hat man die mittlere (baryzentrische) Geschwindigkeit der Mischung so definiert, daß der gesamte diffusive Massenfluß verschwindet.

Die materielle zeitliche Änderung von hydrothermodynamischen Feldfunktionen folgt entweder der mittleren Bewegung der Mischung

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$$

oder den Eigenbewegungen der Partialsubstanzen

$$\frac{d_K}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_K \cdot \nabla,$$

wobei

$$\frac{d_K}{dt} - \frac{d}{dt} = \mathbf{j}_K \cdot \nabla$$

den Zusammenhang zwischen beiden Ableitungen herstellt.

Eine beliebige Feldfunktion der heterogenen Mischung

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \sum_K \frac{\rho_K(\mathbf{x}, t) \Psi_K(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)}$$

erfüllt die folgende Gleichung

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\Psi}{dt} &= \frac{\partial \rho \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \Psi \mathbf{v} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_K \rho_K \Psi_K + \nabla \cdot \sum_K \rho_K \Psi_K (\mathbf{v}_K - \mathbf{j}_K) \\ &= \sum_K \rho_K \left( \frac{\partial}{\partial t} \Psi_K + \mathbf{v}_K \cdot \nabla \Psi_K \right) + \Psi_K \left( \frac{\partial}{\partial t} \rho_K + \nabla \cdot \rho_K \mathbf{v}_K \right) - \nabla \cdot \rho_K \Psi_K \mathbf{j}_K, \end{aligned}$$

die unter Beachtung von

$$\rho_K \frac{d_K}{dt} \Psi_K = \rho_K \left( \frac{\partial \Psi_K}{\partial t} + \mathbf{v}_K \cdot \nabla \Psi_K \right)$$

und unter Vorwegnahme der partiellen Massenbilanzgleichung

$$\frac{\partial \rho_K}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_K \mathbf{v}_K = \dot{\rho}_K^*$$

in die kinematische Identität

$$(1) \quad \boxed{\rho \frac{d\Psi}{dt} = \sum_K \left( \rho_K \frac{d_K}{dt} \Psi_K + \Psi_K \dot{\rho}_K^* - \nabla \cdot \rho_K \Psi_K \mathbf{j}_K \right)}$$

übergeht.

### 1.3 Erhaltungssätze der heterogenen fluiden Mischung

#### 1.3.1 Allgemeine Form der Erhaltungssätze

Innerhalb der heterogenen fluiden Mischung  $\mathcal{B}$  betrachtet man nun ein offenes thermodynamisches System in der Form eines raumfesten Volumens  $V$ . Das thermodynamische System kann

1. Masse, Impuls und Energie mit seiner Umgebung austauschen und
2. materielle, mechanische und energetische Veränderungen in seinem Innern erfahren.

Im raumfesten Volumen ändern sich Masse, Impuls und Energie durch thermodynamische Prozesse, die man für die Erhaltungsgrößen

$$\int_V \rho \Psi \, d\tau = \sum_K \int_V \rho_K \Psi_K \, d\tau$$

in einer allgemeinen integralen Bilanz für die Partialsubstanzen  $\mathfrak{B}_K$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_K \Psi_K \, d\tau = - \oint_{\partial V} \rho_K \Psi_K \mathbf{v}_K \cdot d\mathbf{o} + \oint_{\partial V} \mathfrak{S}_K(\Psi_K) \cdot d\mathbf{o} + \int_V \rho_K P_K(\Psi_K) \, d\tau + \int_V Q_K(\Psi_K) \, d\tau$$

und die Mischung  $\mathfrak{B}$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \Psi \, d\tau = - \oint_{\partial V} \rho \Psi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{o} + \oint_{\partial V} \mathfrak{S}(\Psi) \cdot d\mathbf{o} + \int_V \rho P(\Psi) \, d\tau$$

darstellen kann. Die Bilanzgleichungen besagen, daß die zeitliche Änderung der Erhaltungsgrößen auf folgenden Vorgängen beruht:

1. konvektiven Flüssen, die infolge der Bewegung der Mischung durch die Grenzfläche in das Volumen  $V$  eindringen;
2. Wirkungen, die von der Umgebung auf die Grenzfläche des Volumens ausgeübt werden;
3. äußeren physikalischen Feldern, die direkt auf die Substanzen innerhalb des Volumens einwirken;
4. Quellfunktionsraten, die von Reaktionen und dem Kontakt zwischen den Partialsubstanzen der Mischung herrühren.

Sind die Funktionen in den integralen Bilanzgleichungen stetig, dann kann man zur differentiellen oder lokalen Form

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_K \Psi_K + \nabla \cdot \rho_K \Psi_K \mathbf{v}_K &= \nabla \cdot \mathfrak{S}_K(\Psi_K) + \rho_K P_K(\Psi_K) + Q_K(\Psi_K) \\ \frac{\partial}{\partial t} \rho \Psi + \nabla \cdot \rho \Psi \mathbf{v} &= \nabla \cdot \mathfrak{S}(\Psi) + \rho P(\Psi) \end{aligned} \quad (2)$$

übergehen.

Da die Mischung  $\mathfrak{B}$  aus der Überlagerung ihrer Partialsubstanzen  $\mathfrak{B}_K$  entsteht, muß man nach TRUESDELL [26] verlangen, daß die Bilanzgleichung für  $\rho \Psi$  mit derjenigen für  $\sum \rho_K \Psi_K$  übereinstimmt. Die Summation über alle Partialsubstanzen führt zu

$$\mathfrak{S}(\Psi) = \sum_K (\mathfrak{S}_K(\Psi_K) - \rho_K \mathbf{v}_K \cdot \mathbf{j}_K)$$

$$\rho P(\Psi) = \sum_K \rho_K P_K(\Psi_K)$$

und der Konsistenzbedingung

$$\sum_K Q_K(\Psi_K) = 0 \quad (3)$$

### 1.3.2 Die Massenbilanzgleichung

Die Massendichte  $\rho_K$  einer Partialsubstanz  $\mathfrak{B}_K$  der fluiden Mischung  $\mathfrak{B}$  ändert sich innerhalb eines raumfesten Volumens aufgrund

1. eines Massendichteflusses  $\rho_K \mathbf{v}_K$  durch die Grenzfläche in das Volumen  $V$ ,
2. einer Massendichteerzeugung  $\dot{\rho}_K^*$  durch Massenumwandlungen in der Mischung.

Die Massenbilanzgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_K d\tau = - \oint_{\partial V} \rho_K \mathbf{v}_K \cdot d\mathbf{o} + \int_V \dot{\rho}_K^* d\tau$$

wird - wie in [2] oder [26] angegeben ist - in die lokale Form der Massendichtebilanz

$$(4) \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho_K + \nabla \cdot \rho_K \mathbf{v}_K = \dot{\rho}_K^*}$$

übergeführt.

Finden zwischen den einzelnen Partialsubstanzen der Mischung genau  $r$  verschiedene chemische Reaktionen oder Phasenumwandlungen statt, dann kann man die Massendichteerzeugung von  $\mathfrak{B}_K$  in der Form

$$(5) \quad \boxed{\dot{\rho}_K^* = \sum_K v_{Kr} J_r}$$

schreiben, wobei die Reaktionsgeschwindigkeit

$$J_r = \frac{1}{v_{Kr}} \left( \frac{D \rho_K}{D t} \right)_r$$

die zeitliche Änderung der Massendichte  $\rho_K$  beim Ablauf der Reaktion  $r$  ausdrückt. Die stöchiometrischen Koeffizienten oder Umsatzzahlen  $v_{Kr}$  sagen aus, ob die Partialsubstanz  $\mathfrak{B}_K$  bei der Reaktion  $r$  erzeugt ( $v_{Kr} = +1$ ), nicht beeinträchtigt ( $v_{Kr} = 0$ ) oder verbraucht ( $v_{Kr} = -1$ ) wird.

Die Massendichte der fluiden Mischung  $\mathfrak{B}$  genügt der Kontinuitätsgleichung

$$(6) \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0},$$

wenn man die Definitionen von Massen- und Impulsdichte der Mischung

$$\rho = \sum_K \rho_K, \quad \rho \mathbf{v} = \sum_K \rho_K \mathbf{v}_K$$

verwendet und die Konsistenzbedingung

$$\sum_K \dot{\rho}_K^* = 0$$

beachtet

### 1.3.3 Die Impulsbilanzgleichung

Die zeitliche Änderung der Impulsdichte  $\rho_K \mathbf{v}_K$  einer Partialsubstanz  $\mathcal{B}_K$  der fluiden Mischung  $\mathcal{B}$  setzt sich innerhalb eines raumfesten Volumens  $V$  aus folgenden Vorgängen zusammen:

1. einem Impulsdichtefluß  $\rho_K \mathbf{v}_K \mathbf{v}_K$  durch die Grenzfläche in das Volumen  $V$ ;
2. einem Spannungstensor  $\mathbf{T}_K$ , der die auf die Grenzfläche des Volumens ausgeübte Kraft darstellt und sich aus dem Druck  $p_K$  und dem NAVIER-STOKESschen Reibungstensor  $\mathbf{R}_K$  nach  $\mathbf{T}_K = -p_K \mathbf{E} + \mathbf{R}_K$  zusammensetzt;
3. einer Körperkraftdichte  $\rho_K \mathbf{f}_K$ , die auf die Substanz innerhalb des Volumens wirkt;
4. einer Impulsdichtequelle, die
  - a) aus der Impulsdichteerzeugung  $\dot{\rho}_K^* \mathbf{v}_K^*$  durch Massenumwandlungen in der Mischung und
  - b) aus dem Impulsdichteübergang  $\mathbf{p}_K$  beim Kontakt mit den anderen Partialsubstanzen der Mischung besteht.

Von der integralen Bilanzform

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_K \mathbf{v}_K d\tau = - \oint_{\partial V} \rho_K \mathbf{v}_K \mathbf{v}_K \cdot d\mathbf{o} + \oint_{\partial V} \mathbf{T}_K \cdot d\mathbf{o} + \int_V \rho_K \mathbf{f}_K d\tau + \int_V (\dot{\rho}_K^* \mathbf{v}_K^* + \mathbf{p}_K) d\tau$$

geht man zur lokalen Bilanzgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K \mathbf{v}_K + \nabla \cdot \rho_K \mathbf{v}_K \mathbf{v}_K = \nabla \cdot \mathbf{T}_K + \rho_K \mathbf{f}_K + \dot{\rho}_K^* \mathbf{v}_K^* + \mathbf{p}_K \quad (7)$$

über.

Die Impulsdichtebilanz der fluiden Mischung  $\mathcal{B}$  findet man durch Substitution der partiellen Bilanzgleichungen in die kinematische Identität zu

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{f} \quad , \quad (8)$$

wobei

$$\mathbf{T} = \sum_K (\mathbf{T}_K - \rho_K \mathbf{j}_K \mathbf{j}_K)$$

den Spannungstensor und

$$\rho \mathbf{f} = \sum_K \rho_K \mathbf{f}_K$$

die Körperkraftdichte der Mischung darstellt. Außerdem muß die Konsistenzbedingung

$$\sum_K (\dot{\rho}_K^* \mathbf{v}_K^* + \mathbf{p}_K^*) = \mathbf{0}$$

erfüllt sein.

#### 1.3.4 Die Energiebilanzgleichung

Die thermomechanische Energiedichte  $\rho_K (\frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + e_K)$  einer Partialsubstanz  $\mathcal{B}_K$  der fluiden Mischung  $\mathcal{B}$ , die aus den Dichten von kinetischer, potentieller und innerer Energie besteht, ändert sich innerhalb eines raumfesten Volumens  $V$  mit der Zeit durch folgende Prozesse:

1. einem thermomechanischen Energiedichtefluß  $\rho_K (\frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + e_K) \mathbf{v}_K$  durch die Grenzfläche in das Volumen  $V$ ;
2. einer Leistungsdichte  $\mathbf{T}_K \cdot \mathbf{v}_K$ , die vom Spannungstensor auf die Grenzfläche des Volumens ausgeübt wird;
3. einer thermischen Energiedichteänderung, die aus einem Wärmefluß  $-\mathbf{h}_K$  durch die Grenzfläche besteht;
4. einer Energiedichtequelle mit den Anteilen:
  - a) Energiedichteerzeugung  $\dot{\rho}_K^* (\frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + h_K^*)$  als Folge von Massenumwandlungen in der Mischung, wobei  $h_K^* = e_K^* + \mathbf{p}_K^* / \rho_K$  die Enthalpiedichteerzeugung bedeutet,
  - b) Leistungsdichte  $\mathbf{p}_K \cdot \mathbf{v}_K$  des Impulsüberganges beim Kontakt mit anderen Partialsubstanzen der Mischung,
  - c) Wärmeübergang  $e_K$  beim Kontakt mit anderen Partialsubstanzen der Mischung.

Dann erhält man eine integrale Bilanzgleichung der thermomechanischen Energie

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_K \left( \frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + e_K \right) d\tau = & - \oint_{\partial V} \rho_K \left( \frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + e_K \right) \mathbf{v}_K \cdot d\mathbf{o} + \oint_{\partial V} \mathbf{T}_K \cdot \mathbf{v}_K \cdot d\mathbf{o} - \\ & - \oint_{\partial V} \mathbf{h}_K \cdot d\mathbf{o} + \int_V \left( \dot{\rho}_K^* \left( \frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + h_K^* \right) + \mathbf{p}_K \cdot \mathbf{v}_K + e_K \right) d\tau, \end{aligned}$$

die man in die lokale Form

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K \left( \frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + e_K \right) + \nabla \cdot \rho_K \left( \frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + e_K \right) v_K = \nabla \cdot (T_K \cdot v_K) - \nabla \cdot h_K + \dot{\rho}_K^* \left( \frac{v_K^2}{2} + \Phi_K + h_K \right) + p_K \cdot v_K + \epsilon_K \quad (9)$$

überführt.

Um aus der Bilanzgleichung für die thermomechanische Energiedichte der Partialsubstanz  $\mathcal{B}_K$  die Bilanzgleichung für die innere Energiedichte zu erhalten, berechnet man aus der Impulsdichtebilanz eine Bilanz der kinetischen Energiedichte

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K \frac{v_K^2}{2} + \nabla \cdot \rho_K \frac{v_K^2}{2} v_K = v_K \cdot (\nabla \cdot T_K) + \rho_K f_K \cdot v_K + \dot{\rho}_K^* \left( \frac{v_K^2}{2} - \frac{u_K^2}{2} \right) + p_K \cdot v_K, \quad (10)$$

wobei  $\dot{u}_K^* = \dot{v}_K^* - v_K$  bedeutet, verwendet die aus  $\partial \Phi_K / \partial t = 0$  unter Berücksichtigung von  $\dot{\Phi}_K = \dot{\Phi}_K^*$  folgende Bilanz der potentiellen Energiedichte

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K \Phi_K + \nabla \cdot \rho_K \Phi_K v_K = - \rho_K f_K \cdot v_K + \dot{\rho}_K^* \Phi_K^*, \quad (11)$$

wobei eine äußere konservative Körperkraft  $f_K = - \nabla \Phi_K$  (z.B. Schwerkraft, elektrostatische Kraft) zugrunde gelegt wird, und setzt beide Gleichungen in die Bilanz der Gesamtenergiedichte ein. Das Ergebnis ist eine Bilanz für die innere Energiedichte der Partialsubstanz  $\mathcal{B}_K$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K e_K + \nabla \cdot \rho_K e_K v_K = \nabla v_K \cdot T_K - \nabla \cdot h_K + \dot{\rho}_K^* \left( \frac{u_K^2}{2} + h_K \right) + \epsilon_K \quad (12)$$

Häufig erweist sich die Einführung der Enthalpiedichte

$$\rho_K h_K = \rho_K e_K + p_K$$

von Vorteil, wenn offene thermodynamische Systeme zu kennzeichnen sind  
Mit

$$\frac{\partial}{\partial t} p_K + \nabla \cdot p_K v_K = \rho_K \frac{d_K}{dt} \left( \frac{p_K}{\rho_K} \right) + \frac{p_K}{\rho_K} \dot{\rho}_K^* = \frac{d_K p_K}{dt} + p_K \nabla \cdot v_K$$

und unter Beachtung der Zerlegung

$$\nabla v_K \cdot T_K = - p_K \nabla \cdot v_K + \nabla v_K \cdot R_K$$

kann man die Bilanzgleichung für die innere Energiedichte in die Bilanzgleichung für die Enthalpiedichte

$$(13) \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho_K h_K + \nabla \cdot \rho_K h_K \mathbf{v}_K = \frac{d_K p_K}{dt} + \nabla \mathbf{v}_K \cdot \mathbf{R}_K - \nabla \cdot \mathbf{h}_K + \dot{\rho}_K^* \left( \frac{u_K^{*2}}{2} + h_K^* \right) + \epsilon_K$$

transformieren.

Zur thermomechanischen Energiedichtebilanz der fluiden Mischung  $\mathcal{B}$  gelangt man durch Einsetzen der partiellen Bilanzgleichungen in die kinematische Identität. Man erhält nach einigen Umformungen

$$(14) \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho \left( \frac{\mathbf{v}^2}{2} + \Phi + e \right) + \nabla \cdot \rho \left( \frac{\mathbf{v}^2}{2} + \Phi + e \right) \mathbf{v} = \nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{h} - \nabla \cdot \sum_K \rho_K \Phi_K \mathbf{j}_K$$

wenn man

$$\mathbf{h} = \sum_K (\mathbf{h}_K - \mathbf{T}_K \cdot \mathbf{j}_K + \rho_K (e_K + \frac{\mathbf{j}_K^2}{2}) \mathbf{j}_K)$$

als Wärmefluß der Mischung definiert und außerdem die Konsistenzbedingung

$$\sum_K \left( \dot{\rho}_K^* \left( \frac{v_K^{*2}}{2} + \Phi_K^* + h_K^* \right) + p_K \cdot \mathbf{v}_K + \epsilon_K \right) = 0$$

berücksichtigt.

Zur Bestimmung der Bilanzgleichung für die innere Energiedichte der Mischung  $\mathcal{B}$  verfährt man analog wie im Fall der Partialsubstanzen. Aus der Impulsdichtebilanz berechnet man die kinetische Energiedichtebilanz

$$(15) \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho \frac{\mathbf{v}^2}{2} + \nabla \cdot \rho \frac{\mathbf{v}^2}{2} \mathbf{v} = \mathbf{v} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{T}) + \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} ,$$

ermittelt die potentielle Energiedichte der Mischung aus der kinematischen Identität (vergleiche mit [2])

$$(16) \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho \Phi + \nabla \cdot \rho \Phi \mathbf{v} = - \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} - \sum_K (\rho_K \mathbf{f}_K \cdot \mathbf{j}_K + \nabla \cdot \rho_K \Phi_K \mathbf{j}_K) ,$$

wobei die Konsistenzbedingung  $\sum_K \dot{\rho}_K^* \Phi_K^* = 0$  beachtet wird, und erhält durch

Einsetzen beider Gleichungen in die thermomechanische Energiedichtebilanz eine Gleichung für die innere Energiedichte der Mischung:

$$(17) \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho e + \nabla \cdot \rho e \mathbf{v} = \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{T} - \nabla \cdot \mathbf{h} + \sum_K \rho_K \mathbf{f}_K \cdot \mathbf{j}_K$$

Dabei setzt sich die innere Energiedichte  $\rho e$  der Mischung  $\mathcal{B}$  aus den inneren Energiedichten  $\rho_K e_K$  und den diffusiven kinetischen Energiedichten

$\rho_K \frac{j_K^2}{2}$  der Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$  zusammen:

$$\rho e = \sum_K (\rho_K e_K + \rho_K \frac{j_K^2}{2}) .$$

Thermodynamische Zustandsänderungen dagegen erfordern die Kenntnis der inneren Energiedichte

$$\rho u = \sum_K \rho_K e_K ,$$

deren zeitliche Änderung durch

$$\rho \frac{du}{dt} = \rho \frac{de}{dt} - \rho \frac{d}{dt} \sum_K (c_K \frac{j_K^2}{2})$$

gegeben ist.

### 1.3.5 Zusammenstellung der Bilanzgleichungen

Um die Übersicht über die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energien zu behalten, stellt man die im Bilanzgleichungstyp der Partialsubstanzen

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K \Psi_K + \nabla \cdot \rho_K \Psi_K \mathbf{v}_K = \nabla \cdot \mathcal{S}_K(\Psi_K) + \rho_K P_K(\Psi_K) + Q_K(\Psi_K) + R_K(\Psi_K)$$

vorkommenden Ausdrücke in der Tabelle 1. zusammen.

Die energetischen Transformationen zwischen den Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_J$  und  $\mathcal{B}_K$  sind für den Fall einer zweikomponentigen, reagierenden fluiden Mischung in Abbildung 1. veranschaulicht.

Analog verfährt man bei den Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energien der Mischung, die dem Gleichungstyp

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \Psi + \nabla \cdot \rho \Psi \mathbf{v} = \nabla \cdot \mathcal{S}(\Psi) + \rho P(\Psi) + R(\Psi)$$

genügen, dessen Ausdrücke in der nachfolgenden Tabelle 2. aufgeführt sind

Eine schematische Darstellung der Energieumwandlungen innerhalb der Mischung  $\mathcal{B}$  zeigt Abbildung 2.

|                                |                                                             |                                 |                       |                                                                                                             |                                   |
|--------------------------------|-------------------------------------------------------------|---------------------------------|-----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
|                                | $\rho_K^v$                                                  | $\mathcal{S}_K$                 | $\rho_K^P$            | $\mathcal{Q}_K$                                                                                             | $R_K$                             |
| MASSENDICHTE                   | $\rho_K$                                                    | $\emptyset$                     | $\circ$               | $\overset{*}{\rho}_K$                                                                                       | $\circ$                           |
| IMPULSDICHTE                   | $\rho_K^v$                                                  | $\mathcal{I}_K$                 | $\rho_K^f$            | $\overset{*}{\rho}_K^v + \overset{*}{p}_K$                                                                  | $\circ$                           |
| THERMOMECHAN.<br>ENERGIEDICHTE | $\rho_K \left( \frac{v_K^2}{2} + \frac{1}{2} + e_K \right)$ | $\mathcal{I}_K \cdot v_K - h_K$ | $\circ$               | $\overset{*}{\rho}_K \left( \frac{v_K^2}{2} + \frac{1}{2} + h_K \right) + \overset{*}{p}_K \cdot v_K + e_K$ | $\circ$                           |
| KINETISCHE<br>ENERGIEDICHTE    | $\rho_K \frac{v_K^2}{2}$                                    | $\mathcal{I}_K \cdot v_K$       | $\rho_K^f \cdot v_K$  | $\overset{*}{\rho}_K \left( \frac{v_K^2}{2} - \frac{u_K^2}{2} \right) + \overset{*}{p}_K \cdot v_K$         | $-\nabla v_K \cdot \mathcal{I}_K$ |
| POTENTIELLE<br>ENERGIEDICHTE   | $\rho_K \frac{\phi_K}{2}$                                   | $\emptyset$                     | $-\rho_K^f \cdot v_K$ | $\overset{*}{\rho}_K \frac{\phi_K}{2}$                                                                      | $\circ$                           |
| INNERE<br>ENERGIEDICHTE        | $\rho_K e_K$                                                | $-h_K$                          | $\circ$               | $\overset{*}{\rho}_K \left( \frac{u_K^2}{2} + h_K \right) + e_K$                                            | $\nabla v_K \cdot \mathcal{I}_K$  |

Tab. 1 : Ausdrücke in den Bilanzgleichungen für die Partialsubstanz  $\mathcal{B}_K$ .

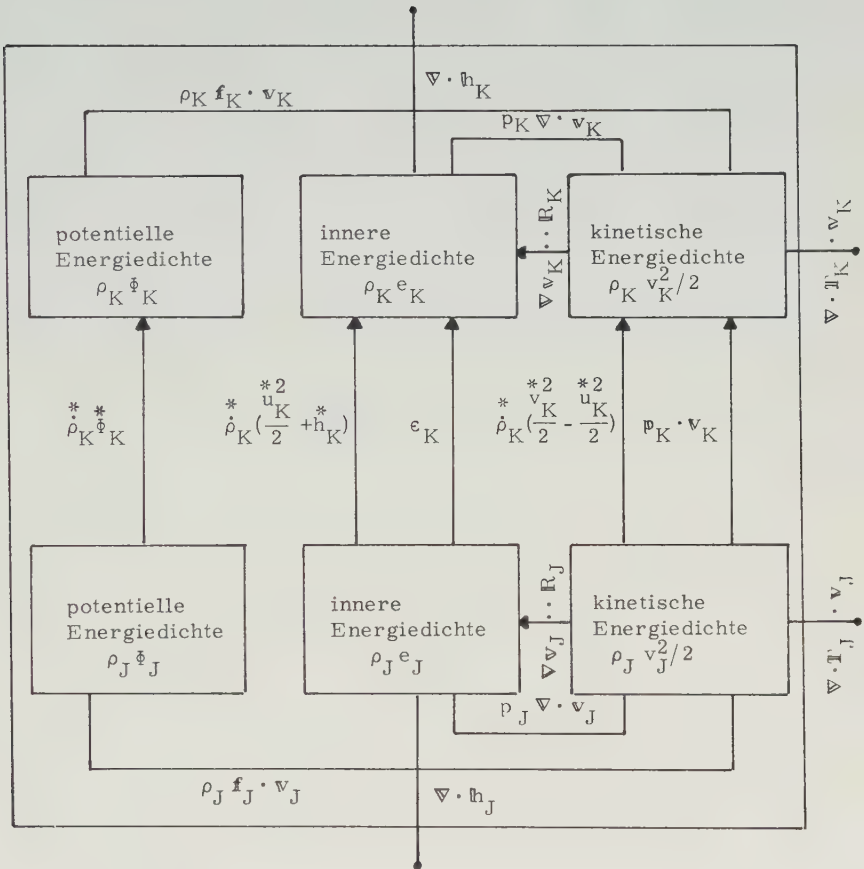


Abb. 1 : Schema der Energieumwandlungen zwischen zwei reagierenden Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_J$  und  $\mathcal{B}_K$  des fluiden Mischungssystems

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}_J \cup \mathcal{B}_K$$

|                                | $\rho \Psi$                                    | $\mathcal{S}$                                                                  | $\rho P$                                                                            | R                                     |
|--------------------------------|------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------|
| MASSENDICHTE                   | $\rho$                                         | $\phi$                                                                         | $\phi$                                                                              | $\phi$                                |
| IMPULSDICHTE                   | $\rho \mathbf{v}$                              | $\mathbf{T}$                                                                   | $\rho \mathbf{f}$                                                                   | $\phi$                                |
| THERMOMECHAN.<br>ENERGIEDICHTE | $\rho \left( \frac{v^2}{2} + \Phi + e \right)$ | $\mathbf{T} \cdot \mathbf{v} - \mathbf{h} - \sum_K \rho_K \Phi_K \mathbf{j}_K$ | $\phi$                                                                              | $\phi$                                |
| KINETISCHE<br>ENERGIEDICHTE    | $\rho \frac{v^2}{2}$                           | $\mathbf{T} \cdot \mathbf{v}$                                                  | $\rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}$                                                  | $-\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{T}$ |
| POTENTIELLE<br>ENERGIEDICHTE   | $\rho \Phi$                                    | $-\sum_K \rho_K \Phi_K \mathbf{j}_K$                                           | $-\rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} - \sum_K \rho_K \mathbf{f}_K \cdot \mathbf{j}_K$ | $\phi$                                |
| INNERE<br>ENERGIEDICHTE        | $\rho e$                                       | $-\mathbf{h}$                                                                  | $\sum_K \rho_K \mathbf{f}_K \cdot \mathbf{j}_K$                                     | $\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{T}$  |

Tab. 2 ; Ausdrücke in den Bilanzgleichungen der Mischung  $\mathcal{B}$ .

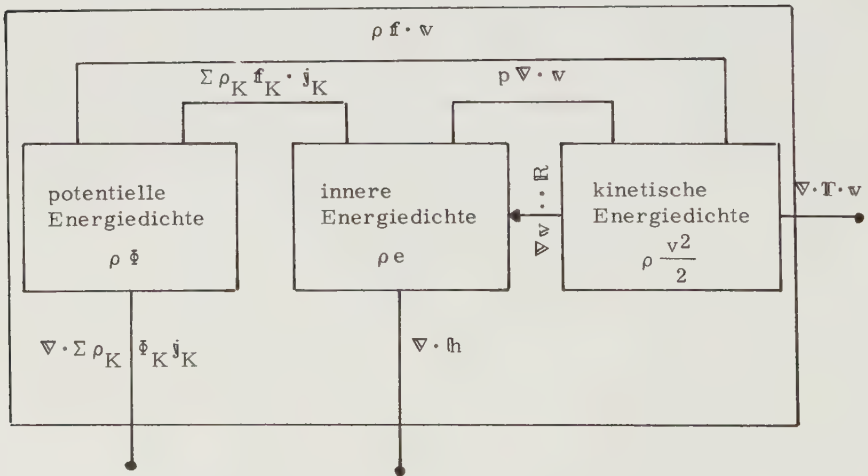


Abb. 2 : Schema der Energieumwandlungen in einem fluiden Mischungssystem  $\mathcal{B}$ .

#### 1.4 Die CLAUSIUS-DUHEMsche Entropieungleichung

Alle Vorgänge, die die Erhaltungssätze von Masse, Impuls und Energie beschreiben, müssen dem Entropieprinzip genügen, welches besagt, daß jede zeitliche Änderung der Entropiedichte  $\rho_K s_K$  einer Partialsubstanz  $\mathcal{B}_K$  der fluiden Mischung  $\mathcal{B}$  größer oder gleich der Änderung ist, die durch folgende thermodynamischen Prozesse in einem raumfesten Volumen  $V$  hervorgerufen wird:

1. einem Entropiedichtefluß  $\rho_K s_K \mathbf{v}_K$  durch die Grenzfläche in das Volumen  $V$ ;
2. einem Entropiedichtefluß  $- \mathbf{h}_K / T_K$ , den der Wärmefluß durch die Grenzfläche in das Volumen bewirkt;
3. einer Entropiedichtequelle, bestehend aus
  - a) der Entropiedichteerzeugung  $\dot{\rho}_K^* s_K^*$  als Folge von Massenumwandlungen in der Mischung und
  - b) dem Entropiedichteübergang  $\eta_K$  beim Kontakt mit den anderen Partialsubstanzen der Mischung.

Von der integralen Entropieungleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho_K s_K d\tau \geq - \oint_V \rho_K s_K \mathbf{v}_K \cdot d\mathbf{o} - \oint_V \frac{\mathbf{h}_K}{T_K} \cdot d\mathbf{o} + \int_V (\dot{\rho}_K^* s_K^* + \eta_K) d\tau$$

kann man zur lokalen CLAUSIUS-DUHEMschen Ungleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K s_K + \nabla \cdot \rho_K s_K \mathbf{v}_K \geq - \nabla \cdot \frac{\mathbf{h}_K}{T_K} + \dot{\rho}_K^* s_K^* + \eta_K \quad (18)$$

übergehen, die sich bei Einführung einer Entropiedichteerzeugung  $\rho_K \sigma_K \geq 0$  auch in Form einer Bilanzgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_K s_K + \nabla \cdot \rho_K s_K \mathbf{v}_K = - \nabla \cdot \frac{\mathbf{h}_K}{T_K} + \dot{\rho}_K^* s_K^* + \eta_K + \rho_K \sigma_K \quad (19)$$

darstellen läßt.

Durch Einsetzen der partiellen Entropiebilanzgleichungen in die kinematische Identität gelangt man zur Entropiedichtebilanzgleichung der Mischung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho s + \nabla \cdot \rho s \mathbf{v} = - \nabla \cdot \mathbf{S} + \rho \sigma \quad , \quad (20)$$

in der

$$S = \sum_K \left( \frac{h_K}{T_K} + \rho_K s_K j_K \right)$$

den Entropiedichtefluß und

$$\rho \sigma = \sum_K \rho_K \sigma_K \geq 0$$

die Entropiedichteerzeugung der Mischung angibt und in der außerdem die Konsistenzbedingung

$$\sum_K (\dot{\rho}_K^* s_K^* + \eta_K) = 0$$

den reversiblen Anteil bei Prozessen zwischen den Partialsubstanzen berücksichtigt.

Es lassen sich abschließend charakteristische Gleichgewichtszustände zwischen den Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$  der Mischung  $\mathcal{B}$  definieren und zwar

1. thermodynamisches Gleichgewicht für  $\sigma_K = 0$ ,
2. thermisches Gleichgewicht für  $\eta_K = \epsilon_K / T_K$  und
3. chemisches Gleichgewicht für  $\dot{\rho}_K^* = 0$ .

### 1.5 Die Materialgleichungen

Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie und die CLAUSIUS DUHEMSche Ungleichung gelten für alle Materialien. Jedoch reagieren verschiedene Substanzen bei Einwirkung gleicher äußerer Felder ganz unterschiedlich, so daß man bestimmte Materialgleichungen benötigt, um ihre individuelle Beschaffenheit zu kennzeichnen. In einer Mischung aus diffundierenden, wärmeleitenden und chemisch reagierenden fluiden Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$  hängen

|                                 |                                                         |
|---------------------------------|---------------------------------------------------------|
| thermomechanische Variable      | $T_K, h_K, e_K, s_K,$                                   |
| Diffusionsvariable              | $\mathbb{P}_K, \epsilon_K, \eta_K$                      |
| und chemische Reaktionsvariable | $\dot{\rho}_K^*, \dot{v}_K^*, \dot{h}_K^*, \dot{s}_K^*$ |

von Geschwindigkeit  $v_K$ , Dichte  $\rho_K$ , Temperatur  $T_K$  und deren Gradienten ab.

Eine allgemeine Zustandskennzeichnung der Mischung liegt vor, wenn zur Zeit  $t$  die vollständige zeitliche Entwicklung der Variablen

$$v_K, \nabla v_K, \rho_K, \nabla \rho_K, T_K, \nabla T_K$$

aller Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$  bekannt ist, so daß die thermomechanischen,

Diffusions- und chemischen Variablen durch Nachwirkungsfunktionale der Form

$$\int_{\tau=-\infty}^{+\infty} \{ \mathbf{v}_K(\tau), \nabla \mathbf{v}_K(\tau), \rho_K(\tau), \nabla \rho_K(\tau), T_K(\tau), \nabla T_K(\tau) \}$$

darzustellen sind. Wenn allerdings die Vorgänge in der Mischung hinreichend langsam ablaufen, dann kann man die Nachwirkung vernachlässigen und von den Funktionalen zu Funktionen

$$F \{ \mathbf{v}_K(t), \nabla \mathbf{v}_K(t), \rho_K(t), \nabla \rho_K(t), T_K(t), \nabla T_K(t) \}$$

übergehen.

Die Materialgleichungen, die das Verhalten der Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$  und der fluiden Mischung während eines thermodynamischen Prozesses beschreiben, müssen der CLAUSIUS-DUHEMSchen Ungleichung genügen. Dadurch werden einer Mischung aus fluiden Partialsubstanzen einschränkende Bedingungen auferlegt. Um diese zu ermitteln führt man zunächst als Zustandsfunktion die HELMHOLTZsche freie Energiedichte für die Partialsubstanzen

$$\rho_K \Psi_K = \rho_K e_K - \rho_K T_K s_K$$

und die Mischung

$$\rho \Psi = \sum_K \rho_K \Psi_K$$

in die CLAUSIUS-DUHEMSche Ungleichung (18) ein und summiert; dann erhält man unter Benutzung der Bilanzgleichung für die innere Energiedichte der Partialsubstanz nach einigen Umformungen

$$\begin{aligned} & - \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \rho \Psi + \sum_K \mathbf{j}_K \cdot \nabla \rho_K \Psi_K + \sum_K \left[ - \nabla \mathbf{v}_K \cdot \mathbf{R}_K + \rho_K \mu_K \nabla \cdot \mathbf{v}_K + \right. \right. \\ & + \rho_K s_K \left( \frac{dT_K}{dt} + \mathbf{j}_K \cdot \nabla T_K \right) + \frac{h_K}{T_K} \cdot \nabla T_K - \\ & \left. \left. - \rho_K^* \left( \frac{u_K^{*2}}{2} + h_K^* - T_K s_K^* \right) + (T_K \eta_K - \epsilon_K) \right] \right\} = \sum_K T_K \rho_K \sigma_K \geq 0 \end{aligned} \quad (21)$$

wobei

$$\rho_K \mu_K = \rho_K \Psi_K + p_K$$

die chemische Potentialdichte der Substanz K bedeutet.

Diese Form der Bilanzgleichung hat den Vorteil, daß die freien Energiedichten die einzigen differenzierten abhängigen Variablen sind, die folglich die materielle Zustandscharakterisierung

$$\Psi_K = \Psi_K(w_K, \nabla w_K, \rho_K, \nabla \rho_K, T_K, \nabla T_K)$$

$$\Psi = \Psi(w_K, \nabla w_K, \rho_K, \nabla \rho_K, T_K, \nabla T_K)$$

übernehmen.

Setzt man die Differentiale der Zustandsfunktionen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho \Psi = \sum_K \left[ \frac{\partial \rho \Psi}{\partial w_K} \cdot \frac{dw_K}{dt} + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla w_K} \cdot \frac{d \nabla w_K}{dt} + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} \frac{d \rho_K}{dt} + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla \rho_K} \cdot \frac{d \nabla \rho_K}{dt} \right. \\ \left. + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial T_K} \frac{dT_K}{dt} + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla T_K} \cdot \frac{d \nabla T_K}{dt} \right] \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \nabla \rho_K \Psi_K = \sum_e \left[ \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial w_K} \cdot \nabla w_K + \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla w_K} \cdot \nabla (\nabla w_K) + \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \rho_K} \nabla \rho_K + \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla \rho_K} \cdot \nabla (\nabla \rho_K) + \right. \\ \left. + \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial T_K} \nabla T_K + \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla T_K} \cdot \nabla (\nabla T_K) \right] \end{aligned}$$

in die Entropieungleichung ein, verwendet die partielle Massenbilanzgleichung

$$\frac{d \rho_K}{dt} = -j_K \cdot \nabla \rho_K - \rho_K \nabla \cdot w_K + \dot{\rho}_K^*$$

und ordnet die einzelnen Terme, dann bleibt:

$$\begin{aligned} - \sum_K \left\{ \left( \frac{\partial \rho \Psi}{\partial w_K} \right) \frac{dw_K}{dt} + \left( j_K \cdot \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial w_K} \right) \cdot \nabla w_K - \nabla w_K \cdot \cdot R_K + \right. \\ \left. + \left( \rho_K u_K - \rho_K \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} \right) \nabla \cdot w_K + \left( \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla w_K} \right) \cdot \frac{d \nabla w_K}{dt} + \right. \\ \left. + j_K \cdot \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla w_K} \cdot \nabla (\nabla w_K) + j_K \left( \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \rho_K} - \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} \right) \cdot \nabla \rho_K + \right. \\ \left. + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla \rho_K} \cdot \frac{d \nabla \rho_K}{dt} + j_K \cdot \left( \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla \rho_K} \right) \cdot \nabla (\nabla \rho_K) + \right. \\ \left. + \left( \frac{\partial \rho \Psi}{\partial T_K} + \rho_K s_K \right) \frac{dT_K}{dt} + \left( j_K \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial T_K} + j_K \rho_K s_K + \frac{h_K}{T_K} \right) \cdot \nabla T_K + \right. \\ \left. + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla T_K} \cdot \frac{d \nabla T_K}{dt} + j_K \cdot \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla T_K} \cdot \nabla (\nabla T_K) + \right. \\ \left. + \dot{\rho}_K^* \left( \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} - \frac{u_K^{*2}}{2} - h_K + T_K s_K^* \right) + (T_K \eta_K - \epsilon_K) \right\} \geq 0. \end{aligned}$$

Da die freie Energie nicht von den zeitlichen Änderungen der Funktionen  $v_K, \nabla v_K, \rho_K, \nabla \rho_K, T_K, \nabla T_K$  abhängt, beschränkt man sich auf Vorgänge, die im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht stattfinden. In der linearen Ungleichung sind Variationen der unabhängigen Funktionen

$$\frac{d}{dt} v_K, \frac{d}{dt} \nabla v_K, \frac{d}{dt} \rho_K, \frac{d}{dt} \nabla \rho_K, \frac{d}{dt} T_K, \frac{d}{dt} \nabla T_K$$

nur dann thermodynamisch zulässig, wenn ihre Koeffizienten verschwinden. Die CLAUSIUS-DUHEMsche Entropieungleichung führt dann zu folgenden Einschränkungen im thermodynamischen Verhalten der fluiden Mischung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \Psi}{\partial v_K} &= \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial v_K} = 0 & \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla \rho_K} &= \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla \rho_K} = 0 \\ \sum_K \mu_K &= \sum_K \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} = \sum_K \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \rho_K} & \sum_K s_K &= - \sum_K \frac{1}{\rho_K} \frac{\partial \rho \Psi}{\partial T_K} = - \sum_K \frac{1}{\rho_K} \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial T_K} \\ \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla v_K} &= \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla v_K} = 0 & \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \nabla T_K} &= \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial \nabla T_K} = 0 \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der Konsistenzbedingungen verbleibt als Rest die Dissipationsungleichung

$$- \sum_K \left\{ \nabla v_K \cdot \cdot R_K + \frac{h_K}{T_K} \cdot \nabla T_K + \mu_K \dot{\rho}_K^* \right\} \geq 0, \quad (22)$$

die aus bilinearen Produkten thermodynamischer Flüsse und Affinitäten besteht.

Den einschränkenden Bedingungen, welche die CLAUSIUS-DUHEMsche Ungleichung der Mischung bei thermodynamischen Vorgängen auferlegt, entnimmt man, daß

1. die freie Energie als Zustandsfunktion der Mischung nur von den Dichten und Temperaturen der Partialsubstanzen abhängt:

$$\Psi = \Psi(\rho_K, T_K)$$

2. die Entropiedichte der Mischung durch

$$\rho s = \sum_K \rho_K s_K = - \sum_K \left( \sum_e \frac{\partial \rho_e \Psi_e}{\partial T_K} \right),$$

der Druck in der Mischung durch

$$p = \sum_K p_K = \sum_K (\rho_K \mu_K - \rho_K \Psi_K) = - \sum_K \frac{1}{\rho_K} \left( \sum_e \rho_e \frac{\partial \Psi_e}{\partial \rho_K} \right)$$

gegeben sind.

Um Materialgleichungen für die übrigen thermomechanischen, Diffusions- und chemischen Variablen zu erhalten, könnte man Polynomentwicklungen in den erwähnten unabhängigen Variablen  $v_K$ ,  $\nabla v_K$ ,  $\rho_K$ ,  $\nabla \rho_K$ ,  $T_K$ ,  $\nabla T_K$  vornehmen. Für linear viskose und wärmeleitende fluide Substanzen findet man in erster Näherung für den Reibungstensor  $\mathbb{R}_K$  den NAVIER-STOKESschen und für die Wärmeleitung  $h_K$  den FOURIERSchen Ansatz.

## 1.6 Die GIBBSsche Gleichung

Die Zustandsänderung der fluiden Mischung hängt mit der Entropieänderung gemäß

$$\frac{d}{dt} \sum_K \rho_K T_K s_K = \frac{d}{dt} (\rho \mu - \rho \Psi)$$

zusammen. Setzt man in diese Identität den aus dem Differential der Zustandsfunktion  $\Psi$  gewonnenen Ausdruck

$$\rho \frac{d\Psi}{dt} = \sum_K \left\{ \left( \rho_K \Psi_K - \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} \frac{d\rho_K}{dt} \right) \nabla \cdot v_K + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial T_K} \frac{dT_K}{dt} - \rho_K \Psi_K \nabla \cdot j_K + \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} \dot{\rho}_K^* - j_K \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} \cdot \nabla \rho_K \right\}$$

und beachtet die thermodynamischen Beziehungen

$$\sum_K \frac{\partial \rho \Psi}{\partial \rho_K} = - \sum_K \rho_K s_K, \quad \sum_K \frac{\partial \rho \Psi}{\partial T_K} = \sum_K \mu_K,$$

dann erhält man die GIBBSsche Gleichung

$$(23) \quad \begin{aligned} \sum_K T_K \frac{d}{dt} c_K s_K &= \frac{du}{dt} + \frac{p}{\rho} \nabla \cdot v + \frac{1}{\rho} \sum_K \mu_K (\nabla \cdot \rho_K j_K - \dot{\rho}_K^*) \\ &= \frac{du}{dt} + \frac{p}{\rho} \nabla \cdot v - \sum_K \mu_K \frac{dc_K}{dt} \end{aligned}$$

Man kann durch Einfügen der inneren Energiedichtebilanz die GIBBSsche Gleichung in Form einer Bilanzgleichung für die Entropiedichte der Mischung

$$(24) \quad \frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho s v = - \nabla \cdot S + \rho \sigma$$

darstellen, in der

$$\begin{aligned} S &= \sum_K \frac{1}{T_K} (h_K + \rho_K T_K s_K j_K) \\ &= \sum_K \frac{1}{T_K} \left( h_K - \rho_K (\mu_K + j_K^2/2) j_K \right) \end{aligned}$$

den Entropiedichtefluß und

$$\rho \sigma = \sum_K \frac{1}{T_K} \left\{ - \frac{h}{T_K} \cdot \nabla T_K - j_K \left[ \rho_K T_K \nabla \left( \frac{\mu_K + j_K^2/2}{T_K} \right) - \rho_K f_K + \rho_K \frac{d j_K}{dt} \right] + \right. \\ \left. + \nabla v \cdot R - \dot{\rho}_K^* \left( \mu_K + \frac{j_K^2}{2} \right) \right\} \quad (25)$$

die Entropiedichteerzeugung darstellt.

Die Entropiedichteerzeugung besteht aus bilinearen Ausdrücken, in denen jeweils Flüsse und Affinitäten miteinander verknüpft sind. Thermodynamische Prozesse, die in der Nähe des Gleichgewichtszustandes verlaufen, können aufgrund der ONSAGERSchen Vorstellungen durch lineare Beziehungen zwischen den Flüssen und ihren Affinitäten erfaßt werden. Die Entropiedichteerzeugung bei chemischen Umsetzungen oder Phasenumwandlungen läßt sich in die Form

$$\sum_K \mu_K \dot{\rho}_K^* = \sum_K \mu_K \sum_r v_{Kr} J_r = - \sum_r A_r J_r \quad (26)$$

überführen, in der die Massenaaffinität

$$A_r = - \sum_K \mu_K v_{Kr} \quad (27)$$

verwendet wird.

Aus der Entropiedichteerzeugung  $\rho \sigma$  der GIBBSschen Gleichung kann man Hinweise zur Formulierung linearer Parametrisierungsansätze erhalten, die Massenumwandlungen, Impuls- und Wärmeübergänge zwischen Partialsubstanzen einer Mischung beschreiben.

### 1.7 Die heterogene und turbulente fluide Mischung

Jenseits einer kritischen REYNOLDSschen Zahl geht die regelmäßige Strömung einer fluiden Mischung in eine turbulente Bewegung über, wodurch der Austausch von Masse, Impuls und Energie innerhalb der Mischung beschleunigt wird. Nach REYNOLDS ist ein turbulentes fluides System als Überlagerung eines mittleren und eines fluktuierenden hydrothermodynamischen Feldes charakterisiert. Auf die stochastische Mittelbildung und ihre nicht ganz unproblematische Ersetzung durch zeitliche und räumliche Mittel soll hier nicht eingegangen werden. Im folgenden werden räumliche Mittelwerte gebildet, die mit der Dichte  $\rho$  der Mischung gewogen sind. Alle Eigenschaften dieser HESSELBERGschen Mittelung können aus der Definition

$$\overline{\rho(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t)} = \frac{1}{V} \int_V \Psi(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \overline{\rho(\mathbf{x}, t) \widehat{\Psi(\mathbf{x}, t)}} \quad (28)$$

hergeleitet werden, in der  $\Psi(\mathbf{x}, t)$  eine beliebige physikalische Feldgröße und

V ein gewisses Volumenelement darstellt.

Jede hydrothermodynamische Feldgröße der Mischung oder einer ihrer Partialsubstanzen kann man sich in einen mittleren und einen fluktuierenden Anteil

$$\Psi = \hat{\Psi} + \Psi''$$

$$\Psi_K = \hat{\Psi}_K + \Psi_K''$$

zerlegt denken und man gewinnt eine kinematische Beschreibung des mittleren Turbulenzfeldes, indem man die Momente der Feldgrößen berechnet. Dabei erfolgt die baryzentrische Momentenbildung für die Mischung  $\mathcal{B}$  nach

$$\begin{aligned} \overline{\rho \Psi} &= \overline{\rho (\hat{\Psi} + \Psi'')} = \rho \hat{\Psi} \\ \overline{\rho \Psi \hat{\Phi}} &= \overline{\rho (\hat{\Psi} + \Psi'') (\hat{\Phi} + \Phi'')} = \overline{\rho \hat{\Psi} \hat{\Phi}} + \overline{\rho \Psi'' \Phi''} \end{aligned}$$

und für die Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$  nach

$$\begin{aligned} \overline{\rho c_K} &= \overline{\rho (\hat{c}_K + c_K'')} = \overline{\rho \hat{c}_K} \\ \overline{\rho c_K \Psi_K} &= \overline{\rho (\hat{c}_K + c_K'') (\hat{\Psi}_K + \Psi_K'')} = \overline{\rho \hat{c}_K \hat{\Psi}_K} + \overline{\rho c_K'' \Psi_K''} \\ \overline{\rho c_K \Psi_K \hat{\Phi}_K} &= \overline{\rho (\hat{c}_K + c_K'') (\hat{\Psi}_K + \Psi_K'') (\hat{\Phi}_K + \Phi_K'')} \\ &= \overline{\rho \hat{c}_K \hat{\Psi}_K \hat{\Phi}_K} + \overline{\rho \hat{c}_K \Psi_K'' \Phi_K''} + \overline{\rho c_K'' \hat{\Psi}_K \hat{\Phi}_K} + \overline{\rho c_K'' \Psi_K'' \hat{\Phi}_K} + \overline{\rho c_K'' \Psi_K'' \Phi_K''} \end{aligned}$$

Da die Mischung eine Überlagerung ihrer heterogenen Partialsubstanzen darstellt, so daß für ihre Dichtefelder

$$\rho \Psi = \sum_K \rho_K \Psi_K$$

gilt, muß auch folgende Definition der mittleren Eigenschaft einer turbulenten fluiden Mischung

$$(29) \quad \overline{\rho \Psi} = \frac{1}{V} \int_V \left( \sum_K \rho_K \Psi_K \right) d\mathbf{x} = \frac{1}{V} \int_V \rho \Psi d\mathbf{x} = \overline{\rho \hat{\Psi}}$$

möglich sein. Außerdem zeigt die Massenbilanzgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \overline{\rho} + \nabla \cdot \overline{\rho \hat{\mathbf{v}}} = 0 \quad ,$$

daß das baryzentrisch bewegte fluide System  $\mathcal{B}$  massenmäßig abgeschlossen bleibt.

Wendet man den baryzentrischen Mittelungsoperator auf die einzelnen Komponenten  $\mathcal{B}_K$  der fluiden Mischung  $\mathcal{B}$  an, so erhält man Bilanzgleichungen, die das mittlere Verhalten dieser Partialsubstanzen im turbulenten bewegten Mischungssystem kennzeichnen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \hat{c}_K + \nabla \cdot (\bar{\rho} \hat{c}_K \hat{w}_K + \overline{\rho c_K'' v_K''}) = \overline{\dot{\rho}_K^*}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \hat{c}_K \hat{w}_K + \overline{\rho c_K'' v_K''}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \hat{c}_K \hat{w}_K \hat{w}_K + \hat{c}_K \overline{\rho v_K'' w_K''} + \overline{\rho c_K'' \hat{w}_K w_K''} + \\ + \overline{\rho c_K'' w_K'' \hat{w}_K} + \overline{\rho c_K'' w_K'' w_K''}) = \nabla \cdot \overline{T_K} + \overline{\rho c_K f_K} + \overline{\dot{\rho}_K^* w_K} + \overline{p_K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \hat{c}_K \frac{\hat{w}_K^2}{2} + \overline{\rho \hat{c}_K \frac{v_K''^2}{2}} + \overline{\rho c_K'' \frac{\hat{w}_K \cdot w_K''}{2}} + \overline{\rho c_K'' \frac{w_K'' \cdot \hat{w}_K}{2}} + \overline{\rho c_K'' \frac{v_K''^2}{2}} + \\ + \nabla \cdot (\bar{\rho} \hat{c}_K \frac{\hat{w}_K^2}{2} \hat{w}_K + \hat{c}_K \overline{\rho \frac{v_K''^2}{2} w_K''} + \text{gemischte Terme}) = \\ = \hat{w}_K \cdot \nabla \cdot \overline{T_K} + \overline{v_K'' \cdot \nabla \cdot T_K} + \overline{\rho_K f_K \cdot w_K} + \overline{\dot{\rho}_K^* \left( \frac{v_K^2}{2} - \frac{u_K^2}{2} \right)} + \overline{p_K \cdot w_K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{c}_K \hat{\Phi}_K + \overline{\rho c_K'' \Phi_K''}) + \nabla \cdot (\rho \hat{c}_K \hat{\Phi}_K \hat{w}_K + \hat{c}_K \overline{\rho s_K'' w_K''} + \overline{\rho c_K'' \hat{\Phi}_K w_K''} + \\ + \overline{\rho c_K'' \Phi_K'' \hat{w}_K} + \overline{\rho c_K'' \Phi_K'' v_K''}) = - \overline{\rho_K f_K \cdot w_K} + \overline{\dot{\rho}_K^* \hat{\Phi}_K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \hat{c}_K \hat{e}_K + \overline{\rho c_K'' e_K''}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \hat{c}_K \hat{e}_K \hat{w}_K + \hat{c}_K \overline{\rho e_K'' w_K''} + \overline{\rho c_K'' \hat{e}_K w_K''} + \overline{\rho c_K'' e_K'' \hat{w}_K} + \\ + \overline{\rho c_K'' e_K'' w_K''}) = \nabla w_K \cdot \overline{T_K} - \nabla \cdot \overline{h_K} + \overline{\dot{\rho}_K^* (u_K^*/2 + h_K)} + \overline{\epsilon_K} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \hat{c}_K \hat{s}_K + \overline{\rho c_K'' s_K''}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \hat{c}_K \hat{s}_K \hat{w}_K + \hat{c}_K \overline{\rho s_K'' w_K''} + \overline{\rho c_K'' \hat{s}_K w_K''} + \\ + \overline{\rho c_K'' s_K'' \hat{w}_K} + \overline{\rho c_K'' s_K'' w_K''}) = - \nabla \cdot \frac{\overline{h_K}}{T_K} + \overline{\dot{\rho}_K^* s_K^*} + \overline{\eta_K} + \overline{\rho_K \sigma_K} \end{aligned}$$

Von den verschiedenen turbulenten Korrelationstermen haben, meiner Ansicht nach, nur die turbulenten Transporte von Masse, Impuls, Energie und Entropie eine größere Bedeutung; über die restlichen Korrelationen läßt sich zur Zeit kaum etwas aussagen, da weder geeignete theoretische Ansätze noch experimentelle Untersuchungen darüber vorliegen. Da in dieser Arbeit eine Behandlung turbulenter Mischungen nicht vorgesehen ist, wird man sich mit den gemittelten Bilanzgleichungen begnügen, die in weiteren Verlauf benötigt werden. Es sind dies folgende Gleichungen in der klassischen Form:

$$\begin{aligned}
 (30) \quad & \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \hat{c}_K + \nabla \cdot \bar{\rho} \hat{c}_K \hat{w}_K = \nabla \cdot \overline{(-\rho c_K'' w_K'')} + \dot{\bar{\rho}}_K^* \\
 & \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \hat{c}_K \hat{w}_K + \nabla \cdot \bar{\rho} \hat{c}_K \hat{w}_K \hat{w}_K = \nabla \cdot (-\hat{c}_K \overline{\rho w_K'' w_K''}) + \nabla \cdot \overline{T_K} + \overline{\rho_K f_K} + \overline{\dot{\rho}_K^* w_K^*} + \overline{p_K} \\
 & \frac{\partial}{\partial t} \rho \hat{c}_K \hat{e}_K + \nabla \cdot \rho \hat{c}_K \hat{e}_K \hat{w}_K = \nabla \cdot (-\hat{c}_K \overline{\rho e_K'' w_K''}) + \nabla w_K \cdot \overline{T_K} - \nabla \cdot \overline{h_K} + \\
 & \quad + \overline{\dot{\rho}_K^* \left( \frac{u_K^2}{2} + h_K^* \right)} + \overline{e_K}
 \end{aligned}$$

Die REYNOLDSschen Flüsse lassen sich durch einfache konstitutive Gleichungen approximieren, die man als lineare Beziehungen zwischen dem turbulenten Fluß  $\overline{\rho \Psi_K'' w_K''}$  und dem Gradienten der zugehörigen mittleren physikalischen Größe  $\hat{\Psi}_K$  formuliert:

$$(31) \quad \overline{-\rho \Psi_K'' w_K''} = \bar{\rho} \mathbb{K}(\Psi_K) \cdot \nabla \hat{\Psi}_K,$$

wobei  $\mathbb{K}(\Psi_K)$  den turbulenten Austauschtensor der jeweiligen Eigenschaft  $\Psi_K$  darstellt.

Für die turbulent bewegte fluide Mischung  $\mathfrak{B}$  kann man ebenfalls gemittelte Bilanzgleichungen aufstellen, die man entweder gemäß den TRUESDELLschen Vorstellungen durch Überlagerung der gemittelten Bilanzgleichungen der einzelnen Partialsubstanzen  $\mathfrak{B}_K$  gewinnt oder durch Mittelung der Mischungs-  
gleichungen selbst, wie es FORTAK [8] durchgeführt hat.

## 2. DIE MIKROSTRUKTUR DES FLUIDEN SYSTEMS

### 2.1 Die dispersen Partialsubstanzen in der Wolke

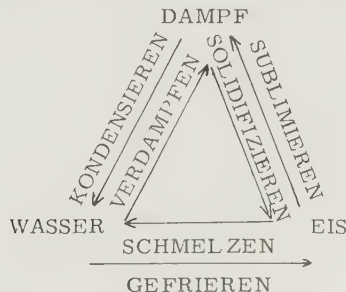
Die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie der Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$  sind über gewisse Quellfunktionsraten miteinander verknüpft, die sich aus den Erzeugungsraten beim Ablauf chemischer Reaktionen oder Phasenumwandlungen und aus den Übergangsraten beim gegenseitigen Kontakt in der Mischung  $\mathcal{B}$  zusammensetzen. In dieser Arbeit interessieren insbesondere die Quellfunktionsraten für Masse, Impuls und innere Energie der Partialsubstanzen, die in Tabelle 3. aufgeführt sind.

|                      | ERZEUGUNGSRATE                                             | ÜBERGANGSRATE |
|----------------------|------------------------------------------------------------|---------------|
| MASSENDICHTE         | $\dot{\rho}_K^*$                                           |               |
| IMPULSDICHTE         | $\dot{\rho}_K^* v_K^*$                                     | $p_K$         |
| INNERE ENERGIEDICHTE | $\dot{\rho}_K^* \left( \frac{u_K^{*2}}{2} + h_K^* \right)$ | $e_K$         |

Tab. 3: Quellfunktionsraten der Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_K$ .

Um die Erzeugungs- und Übergangsraten bestimmen zu können, muß man auf Struktur und Eigenschaften der verschiedenen Partialsubstanzen in der Mischung eingehen und die Wechselwirkung zwischen ihnen explizit angeben.

Eine Wolke ist nur in der makroskopischen Betrachtungsweise eine Mischung aus den Partialsubstanzen Luft  $\mathcal{B}_0$ , Wasserdampf  $\mathcal{B}_1$ , Wasser  $\mathcal{B}_2$  und Eis  $\mathcal{B}_3$ ; in Wirklichkeit sind in der Feuchtluft  $\mathcal{B}_M = \mathcal{B}_0 \cup \mathcal{B}_1$  verschiedenen große Wassertropfen und Eisteilchen enthalten. An diesen Partikelsystemen in der Wolke vollziehen sich die Phasenumwandlungen zwischen den Aggregatzuständen des Wassers,



deren physikalische Beschreibung man bei Übergängen von Wasserdampf zu Wasser und Eis beherrscht. Dagegen sind Umwandlungen zwischen Wasser und Eis in den Partikelsystemen der Wolke noch nicht genügend erforscht, um über eine Vielzahl von Hypothesen hinauszukommen. Aus diesem Grunde wird im folgenden auf eine Einarbeitung der Eisphase in die Mikrostruktur der Wolken verzichtet. Es muß aber betont werden, daß bei einer theoretischen Behandlung mit allen Aggregatzuständen des Wassers keine prinzipiellen Schwierigkeiten auftreten. Zukünftige Forschung in der Mikrostruktur der Wolken wird sich intensiv mit dem Problem des Schmelzens und Gefrierens von Wolkenteilchen befassen müssen.

In mikrostrukturierten Wasserwolken ist die Wassersubstanz der heterogenen Mischung als ein polydisperses Tropfensystem definiert. Zusätzliche Partikelgleichungen beschreiben das Phasenwachstum, den Zerfall und die Sedimentation einzelner Tropfen sowie die Anlagerung der Tropfen aneinander. Den Wasserdampfaustausch zwischen Tropfenverteilung und Feuchtluft hat insbesondere HOWELL [11] untersucht. Formulierungen der Koagulation von Teilchen gehen auf SMOLUCHOWSKI [24] zurück. Da das Verhalten einzelner Tropfen und der Tropfenverteilung bekannt ist, ist es möglich, die Wechselwirkung zwischen feuchter Luft und Wassertropfenverteilung in Form von Quellfunktionsraten anzugeben.

Außerdem kann man spezielle Aspekte der Zustandänderung mikrostrukturierter Wolkenelemente aus der GIBBSschen Gleichung gewinnen, doch würde eine über SCHNAI DT [23] hinausgehende Behandlung der Adiabatenproblematik zu weit gehen.

## 2.2 Das Verhalten des Partikelsystems einer Wasserwolke

### 2.2.1 Die Bilanzgleichung der Anzahldichteverteilung

Man beschreibt die polydisperse Wassersubstanz durch eine Anzahldichteverteilung  $f(\mathbf{x}, m, t)$ , die nur von der Tropfenmasse als dem einzigen physikalischen Parameter abhängt, so daß  $f(\mathbf{x}, m, t) dm$  die Anzahl der Tropfen in der Volumeneinheit angibt, die sich am Raum-Zeitpunkt  $(\mathbf{x}, t)$  im Massenbereich  $(m, m+dm)$  befinden. Jede Funktion der Masse kann als Parameter in der Anzahldichteverteilung verwendet werden und eine Transformation hat dabei so zu erfolgen, daß die Tropfenzahl erhalten bleibt. Wählt man statt der Masse den Radius  $r = \left( \frac{3m}{4\pi\rho_r} \right)^{1/3}$  der Tropfen, dann folgt aus der Bedingung

$$f(r) dr = f(m) dm$$

die neue Anzahldichteverteilung

$$f(r) = f(m) \frac{dm}{dr} = \frac{3m}{r} f(m)$$

Da sich die Massendichte der dispersen Wassersubstanz aus den Massendichten der Wolkentropfen

$$\rho_2(\mathbf{x}, t) = \int_M \mathbf{m} f(\mathbf{x}, \mathbf{m}, t) d\mathbf{m}$$

zusammensetzt, kann man die Bilanzgleichung für die Massendichte durch die Bilanzgleichung für die Anzahldichteverteilung  $f(\mathbf{m})$  ersetzen, die sich innerhalb eines raumfesten Volumens  $V$  durch

1. einen Anzahldichtefluß  $f(\mathbf{m}) \mathbf{w}(\mathbf{m})$  durch die Grenzfläche in das Volumen  $V$  und
2. eine Anzahldichteerzeugung  $f^*(\mathbf{m})$

ändert.

Man kann nun versuchsweise den Ansatz der integralen Bilanz auf die Anzahldichteverteilung anwenden

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V f(\mathbf{m}) d\tau = - \oint_{\partial V} f(\mathbf{m}) \mathbf{w}(\mathbf{m}) \cdot d\mathbf{o} + \int_V f^*(\mathbf{m}) d\tau$$

und dann unter Voraussetzung der Stetigkeit zur lokalen Bilanzgleichung

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{m}) + \nabla \cdot f(\mathbf{m}) \mathbf{w}(\mathbf{m}) = f^*(\mathbf{m})} \quad (32)$$

übergehen.

Dabei besteht die Anzahldichteerzeugung  $f^*(\mathbf{m})$  aus drei Anteilen:

1. einer Divergenz des Anzahldichteflusses im Massenraum  $M$  (Rand  $\partial M$ )

$$- \frac{\partial}{\partial m} (f(\mathbf{m}) \frac{Dm}{Dt}),$$

die durch eine Größenänderung der Tropfen beim Wasserdampfaustausch mit der Feuchtluft zustande kommt, wobei  $\frac{D}{Dt} m$  die Phasenwachstumsgeschwindigkeit des Tropfens der Masse  $m$  ist;

2. einer Koagulation von Tropfen durch Zweierstöße, wodurch eine Veränderung in der Anzahldichteverteilung bei konstanter Masse der Wassersubstanz erzielt wird; sie wird durch einen symmetrischen, bilinearen Operator

$$Q(f(\mathbf{m}) f(\mathbf{m}))$$

dargestellt;

3. einen Zerfall von Tropfen, wodurch ebenfalls eine Veränderung in der Anzahldichteverteilung bei konstanter Wassermasse stattfindet; er wird durch einen linearen Operator

$$Z(f(\mathbf{m}))$$

gekennzeichnet.

Mit diesen Angaben läßt sich die zeitliche Änderung der Anzahldichteverteilung des polydispersen Partikelsystems durch die Bilanzgleichung

$$(33) \quad \frac{\partial}{\partial t} f(m) + \nabla \cdot f(m) w(m) = - \frac{\partial}{\partial m} \left( f(m) \frac{Dm}{Dt} \right) + Q(f(m) f(m)) + Z(f(m))$$

beschreiben.

Um den angewendeten Bilanzansatz zu rechtfertigen, integriert man die Anzahldichteverteilung über alle Tropfenmassen. Man erhält dann die Bilanzgleichung für die Massendichte der dispersen Partials substanz  $\mathcal{B}_2$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_2 + \nabla \cdot \rho_2 w_2 = \dot{\rho}_2^*$$

mit der Massendichte

$$\rho_2 = \int_M m f(m) dm,$$

der Impulsdichte

$$\rho_2 w_2 = \int_M m f(m) w(m) dm$$

und der Erzeugungsdichte

$$\dot{\rho}_2^* = \int_M f(m) \frac{Dm}{Dt} dm - \left[ m f(m) \frac{Dm}{Dt} \right] \partial M.$$

Koagulation und Zerfall innerhalb des Tropfensystems lassen die Wassermasse unverändert und folglich muß

$$\int_M m Q(f(m) f(m)) dm = 0$$

$$\int_M m Z(f(m)) dm = 0$$

sein.

## 2.2.2 Die gemittelte Bilanzgleichung der Anzahldichteverteilung bei Wolkenturbulenz

Eine Beschreibung der zeitlichen Änderung der mittleren Anzahldichteverteilung von Tropfen in der turbulent bewegten Feuchtluft der Wolke geht von der Bilanzgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho g(m) + \nabla \cdot \rho g(m) w(m) = - \frac{\partial}{\partial m} \left( \rho g(m) \frac{Dm}{Dt} \right) + Q(\rho g(m) \rho g(m)) + Z(\rho g(m))$$

aus, in der die Anzahldichte

$$g(m) = \frac{f(m)}{\rho}$$

verwendet wird. Durch baryzentrische Mittelung erhält man daraus die Gleichung für den mittleren Zustand eines turbulent durchmischten Tropfensystems:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \hat{g}(m) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \hat{g}(m) \hat{v}(m) + \overline{\rho g''(m) w''(m)}) = \\ = - \frac{\partial}{\partial m} \left( \bar{\rho} \hat{g}(m) \frac{\hat{Dm}}{D t} + \overline{\rho g''(m) \left( \frac{Dm}{D t} \right)''} \right) + \bar{\rho} Q (\bar{\rho} \hat{g}(m) \hat{g}(m) + \overline{\rho g''(m) g''(m)}) + \\ + Z (\bar{\rho} \hat{g}(m)) . \end{aligned}$$

Vernachlässigt man das stochastische Phasenwachstum, das auf turbulenten Schwankungen der Feuchtigkeit in der Atmosphäre beruht, sowie die stochastische Koagulation der Tropfen und verwendet für den mittleren turbulenten Austausch der Anzahldichte den SCHMIDT'schen Austauschansatz

$$- \overline{\rho g''(m) w''(m)} = \bar{\rho} K (g(m)) \cdot \nabla \hat{g}(m) ,$$

so ergibt sich die folgende Bilanzgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \hat{g}(m) + \nabla \cdot \bar{\rho} \hat{g}(m) \hat{v}(m) = \\ = - \frac{\partial}{\partial m} \left( \bar{\rho} \hat{g}(m) \frac{\hat{Dm}}{D t} \right) + Q (\bar{\rho} \hat{g}(m) \bar{\rho} \hat{g}(m)) + Z (\bar{\rho} \hat{g}(m)) + \nabla \cdot (\bar{\rho} K (g(m)) \cdot \nabla \hat{g}(m)) \end{aligned}$$

welche mit der Beziehung

$$\hat{f}(m) = \bar{\rho} \hat{g}(m)$$

in die Form

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \hat{f}(m) + \nabla \cdot \hat{f}(m) \hat{v}(m) = - \frac{\partial}{\partial m} \left( \hat{f}(m) \frac{\hat{Dm}}{D t} \right) + Q (\hat{f}(m) \hat{f}(m)) + \\ + Z (\hat{f}(m)) + \nabla \cdot \bar{\rho} K (g(m)) \cdot \nabla \hat{g}(m) \end{aligned}} \quad (34)$$

übergeht.

## 2.3 Das Wachstum der Wolkentropfen

Zur Bestimmung der Anzahldichte- und Massendichteerzeugung der Wasser-Substanz in den entsprechenden Erhaltungsgleichungen muß man den Vorgang des Massenaustausches zwischen Wasserdampf und Wassertropfen kennen. Wolkentropfen entstehen durch Anlagerung von Wassermolekülen an hygroskopische Aerosolteilchen, so daß sie meist aus einem unlöslichen Kern bestehen, der von einer Elektrolytlösung umgeben ist. Die Lösungströpfchen vergrößern sich in einer wasserdampfhaltigen Umgebung, indem Wasserdampf zur Tropfenoberfläche diffundiert und sich in Wasser umwandelt. Die an der bewegten Phasentrennfläche freiwerdende Umwandlungswärme strömt in den Tropfen und breitet sich in der umgebenden Feuchtluft aus

### 2.3.1 Die BRADLEY'sche Wachstumsgleichung

Die zeitliche Änderung der Tropfenmasse erfolgt durch Massentransport, der

1. im Kontinuumsbereich - in dem die mittlere freie Weglänge  $\lambda$  der Wasserdampfmoleküle klein gegenüber dem Tropfenradius  $r$  ist ( $\lambda/r \ll 1$ ) - durch einen FICKschen diffusiven Massenfluß im quasistationären Wasserdampfdichtefeld beschrieben wird;
2. in der kinetischen Grenzschicht - die im Abstand der mittleren freien Weglänge  $\lambda$  der Wasserdampfmoleküle den Tropfen umhüllt ( $\lambda/r \gg 1$ ) - durch die Oberflächenwachstumsrate gegeben ist.

Die FICKsche Wasserdampfdiffusion, die bis zu einer Entfernung  $\lambda$  von der Tropfenoberfläche reicht, ist durch

$$(35) \quad \frac{D}{Dt} m(r + \lambda) = 4\pi(r + \lambda)^2 D \frac{Sh}{2} \left( \frac{\partial \rho_1}{\partial R} \right)_{R=r+\lambda}$$

definiert.  $D$  ist der molekulare Diffusionskoeffizient von Wasserdampf in Luft und  $Sh/2$  berücksichtigt den konvektiven Massenübergang am fallenden Tropfen, wobei

$$Sh = 2 + 0.6 Re^{1/2} Sc^{1/3}$$

die SHERWOODsche Massenübergangszahl darstellt.  $\left( Re = \frac{2\rho_M V r}{\eta_M}, Sc = \frac{\eta_M}{\rho_M D} \right)$

Um den Gradienten  $\left( \frac{\partial \rho_1}{\partial R} \right)_{r+\lambda}$  der Wasserdampfdichte  $\rho_1(R, t)$  zu bestimmen, löst man die kugelsymmetrische Diffusionsgleichung am ruhenden Tropfen

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_1 = \frac{D}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} (R^2 \frac{\partial}{\partial R} \rho_1)$$

unter den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \rho_1(R, t) &= \rho_1(\infty) & \text{für } R \rightarrow \infty \\ \rho_1(R, t) &= \rho_1(r + \lambda) & \text{für } R \rightarrow r + \lambda \end{aligned}$$

und mit der Anfangsbedingung

$$\rho_1(R, t) = \rho_1(\infty) \quad \text{für } t = 0.$$

Das Ergebnis lautet

$$\rho_1(R, t) = \rho_1(r + \lambda) + (\rho_1(\infty) - \rho_1(r + \lambda)) \left[ 1 - \frac{r + \lambda}{R} \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{R - (r + \lambda)}{\sqrt{4Dt}} \right) \right) \right],$$

wobei

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) d\xi$$

die Fehlerfunktion ist. In unmittelbarer Umgebung des Tropfens und für Zeiten  $t \gg \frac{(r + \lambda)^2}{4D}$  wird

$$\operatorname{erf}\left(\frac{R - (r + \lambda)}{\sqrt{4Dt}}\right) \approx \operatorname{erf}(0) = 0.$$

Unter diesen Voraussetzungen kann man die instationäre Anlaufzeit des Diffusionsvorganges vernachlässigen und sich auf die quasistationäre Diffusion beschränken, die unter dem Wasserdampfdichtegradienten

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial R} = \frac{r + \lambda}{R^2} (\rho_1(\infty) - \rho_1(r + \lambda))$$

verläuft. Dann ergibt sich der quasistationäre Wasserdampfdichtefluß in der Entfernung  $\lambda$  von der Tropfenoberfläche

$$\frac{Dm(r + \lambda)}{Dt} = 4\pi D \frac{Sh}{2} (r + \lambda) (\rho_1(\infty) - \rho_1(r + \lambda)) \quad (36)$$

in der Form der MAXWELLSchen Gleichung.

Der Massenfluß in der kinetischen Grenzschicht um den Tropfen, die von einer Unstetigkeit der Wasserdampfdichte an seiner Oberfläche herrührt, wird durch die HERTZ-KNUDSENSche Formel

$$\frac{D}{Dt} m(r) = 4\pi r^3 \alpha \sqrt{\frac{R_1}{2\pi}} \left( \rho_1(r + \lambda) \sqrt{T_M(r + \lambda)} - \rho_1(r) \sqrt{T_M(r)} \right)$$

gegeben. Dabei ist  $\alpha$  der Massenflußakkommodationskoeffizient,  $T_M$  die Feuchtlufttemperatur und  $R_1$  die Gaskonstante von Wasserdampf. Für  $T_M(r + \lambda) = T_M(r)$  geht der Massenfluß in

$$\frac{D}{Dt} m(r) = 4\pi r^3 \Psi(\alpha) (\rho_1(r + \lambda) - \rho_1(r)) \quad (37)$$

über, wobei

$$\Psi(\alpha) = \alpha \sqrt{\frac{R_1 T_M}{2\pi}}$$

den Oberflächenwachstumskoeffizienten kennzeichnet.

Die Tropfenoberfläche absorbiert von den auftreffenden Wasserdampfmolekülen nur den durch den Massenflußakkommodationskoeffizienten angegebenen Bruchteil  $\alpha$ ; der Bruchteil  $1 - \alpha$  wird von ihr reflektiert. Je kleiner  $\alpha$  ist, um so mehr verzögert sich das Tropfenwachstum. Für eine reine Wasseroberfläche haben ALTY & McKAY  $\alpha = 0.034$  gemessen. Sind die Wassertropfchen von dünnen Filmen meist organischer Verunreinigungen bedeckt, dann wird  $\alpha$  um ein Vielfaches kleiner. Unter Umständen verringert sich die Phasenwachstumsgeschwindigkeit so sehr, daß die Tropfen klein bleiben. Diese Erscheinung kann man bei Nebeln beobachten, die sich in Industriegebieten nur sehr langsam auflösen.

Bei vorgegebenem Massendiffusionskoeffizienten  $D$   $Sh/2$  und Oberflächenwachstumskoeffizienten  $\Psi(\alpha)$  bestimmt man die Phasenwachstumsgeschwindigkeit, indem man die Wasserdampfdichte  $\rho_1(r+\lambda)$  aus den adaptierten Massenflüssen

$$\frac{D}{Dt} m(r+\lambda) = \frac{D}{Dt} m(r)$$

eliminiert und gelangt so zur BRADLEYschen Gleichung

$$(38) \quad \frac{D}{Dt} m(r) = 4 \pi r D \frac{Sh}{2} \epsilon(\alpha) (\rho_1(\infty) - \rho_1(r)) \quad ,$$

in der

$$\epsilon(\alpha) = \left\{ \frac{D \frac{Sh}{2}}{\Psi(\alpha) r} + \frac{r}{r+\lambda} \right\}^{-1}$$

bedeutet. Jeweils der langsamere der beiden Prozesse - Massendiffusion oder Massenanlagerung - kontrolliert die Wachstumsrate. Da die turbulente erzwungene Konvektion um den Tropfen den Massenfluß fördert, begünstigen andererseits eine niedrige Übersättigung  $\rho_1(\infty) - \rho_1(r)$  und eine niedrige Turbulenzintensität die Steuerung der Wachstumsrate durch die Massenanlage-

### 2.3.2 Der Sättigungsdampfdruck an der Oberfläche eines Lösungstropfens

Um die BRADLEYsche Gleichung auswerten zu können, muß die Wasserdampfdichte oder der Wasserdampfdruck an der Oberfläche des Lösungstropfchens bekannt sein. Zur Bestimmung dieser Größe nimmt man an, daß der Tropfen mit dem Radius  $r$  sowohl im mechanischen als auch im chemischen Gleichgewicht mit seiner Feuchtluftumgebung steht (DUFOUR DE-FAY [4]). Die LAPLACEsche Gleichung

$$p_2(r) = (p_o(r) + p_1(r)) + \frac{2\sigma}{r}$$

gibt die Beziehung zwischen dem Druck  $p_2$  innerhalb und dem Druck  $p_o + p_1$  außerhalb des Tropfens an, wobei  $\sigma$  die Grenzflächenspannung zwischen der wässrigen Lösung und der Feuchtluft bedeutet. Phasengleichgewicht an der Tropfenoberfläche besagt, daß  $p_1(r)$  gleich dem Sättigungsdampfdruck von Wasserdampf ist. Außerdem herrscht an der Tropfenoberfläche lokales thermisches Gleichgewicht.

Nun ist der Sättigungsdampfdruck  $p'_{1s}(r)$  an der Oberfläche eines wachsenden Lösungsströpfchens mit dem Radius  $r(t)$  abhängig von

1. der Temperatur an der Tropfenoberfläche, die im lokalen thermischen Gleichgewicht mit der Temperatur der sie umhüllenden Feuchtluft steht,
2. der Oberflächenkrümmung (KELVINscher Effekt), denn über einem

Tropfen ist der Gleichgewichtsdampfdruck größer als über einer ebenen Fläche,

3. der Lösung (RAOULTscher Effekt); denn über wässrigen Lösungsflächen ist der Dampfdruck niedriger als über reinen Wasseroberflächen.

Man erhält den Sättigungsdampfdruck an der Oberfläche eines Lösungstropfens, der die gesuchte Randbedingung im Wasserdampfdiffusionsfeld um den Tropfen liefert, indem man das thermodynamische System betrachtet, das aus einem Lösungstropfen in einer Wasserdampf-Luftmischung besteht.

Der Zustand der in diesem System enthaltenen Substanzen muß der thermodynamischen Beziehung

$$Ts_K = u_K + \frac{p_K}{\rho_K} - \mu_K$$

genügen, die für das gesamte System in

$$Ts = u + \frac{p}{\rho} - \sum_K c_K \mu_K$$

übergeht. Die Gleichung für die Zustandsänderung

$$d(Ts) = du + d\left(\frac{p}{\rho}\right) - d\left(\sum_K c_K \mu_K\right)$$

reduziert sich unter Berücksichtigung der GIBBSschen Gleichung

$$T ds = du + p d\left(\frac{1}{\rho}\right) - \sum_K \mu_K dc_K$$

auf die GIBBS-DUHEMsche Gleichung

$$\boxed{s dT = \frac{dp}{\rho} - \sum_K c_K d\mu_K} \quad . \quad (39)$$

Da man die Wasserdampf-Luftmischung als eine ideale Mischung auffassen kann, lassen sich die chemischen Potentialänderungen von trockener Luft und Wasserdampf getrennt aufführen:

$$d\mu_0 = \frac{dp_0}{\rho_0} - s_0 dT$$

$$d\mu_1 = \frac{dp_1}{\rho_1} - s_1 dT .$$

Für die Änderung des chemischen Potentials von Wasser in einer Lösung hat man dagegen (wobei ausnahmsweise in diesem Kapitel mit  $\rho_2$  die Dichte von reinem Wasser bezeichnet wird)

$$\begin{aligned} d\mu_2 &= \frac{dp_2}{\rho_2} - s_2 dT + R_1 T d(\ln f_2 x_2) \\ &= \frac{dp_2}{\rho_2} - s_2 dT + R_1 T d(\Phi_2 \ln x_2) \end{aligned}$$

zu nehmen, wobei

$$x_2 = \frac{n_2}{n_2 + n_s}$$

den Molenbruch von Wasser in der Lösung,  $n_2$  die Molzahl von Wasser und  $n_s$  diejenige des gelösten Salzes bedeuten und wobei  $f_2$  den Wasseraktivitätskoeffizienten und  $\Phi_2$  den osmotischen Koeffizienten in der Lösung bezeichnet.

Die Bedingung des lokalen Phasengleichgewichts an der Grenzfläche zwischen der wässrigen Lösung und dem Wasserdampf erfordert, daß die Massenaffinität verschwindet:

$$dA = d\mu_1 - d\mu_2 = 0.$$

Dann ist die Zustandsänderung im System Lösungströpfchen-Wasserdampf

$$dA = \frac{dp'_1(r)}{\rho_1} - \frac{dp_2}{\rho_2} - (s_1 - s_2) dT(r) - R_1 T(r) d(\Phi_2 \ln x_2) = 0$$

und man gelangt unter Beachtung von

$$T(r)(s_1 - s_2) = L - A$$

und der Tatsache, daß Phasenumwandlungen ( $A = 0$ ) mit  $dT(r) = 0$  ablaufen, zur Gleichung

$$d \ln p'_{1s}(r) = \frac{1}{\rho_2 R_1 T(r)} d\left(\frac{2\sigma}{r}\right) + d(\Phi_2 \ln x_2)$$

Durch Integration dieser Gleichung erhält man den Sättigungsdampfdruck von Wasserdampf  $p'_{1s}(r)$  über einem Lösungstropfen verglichen mit dem Sättigungsdampfdruck  $p_{1s}$  über einer ebenen reinen Wasserfläche:

$$(40) \quad \ln \frac{p'_{1s}(r)}{p_{1s}} = \left( \frac{2\sigma}{\rho_2 R_1 T(r)} \right) \frac{1}{r} + \Phi_2 \ln x_2$$

Der Molenbruch des Wassers in der Elektrolytlösung hängt von der Natur und Masse des gelösten Salzes ab:

$$x_2 = \frac{n_2}{n_2 + n_s} = \frac{m_2/M_2}{m_2/M_2 + m_s/M_s} = \frac{(m'_2 - m_s) M_s}{(m'_2 - m_s) M_s + m_s M_2}$$

Dabei sind  $m_2$ ,  $M_2$ ,  $n_2$  Masse, Molmasse und Molzahl von reinem Wasser und  $m_s$ ,  $M_s$ ,  $n_s$  die entsprechenden Größen des Salzes.

Bei verdünnten Lösungen kann die Masse der Lösung durch

$$m'_2 = m_2 + m_s \approx m_2 = \frac{4\pi}{3} (r^3 - r_K^3)$$

approximiert werden, wobei  $r_K$  den äquivalenten Radius des unlöslichen Kerns eines hygroscopischen Aerosolteilchens bezeichnet. Unter Verwendung des reziproken Molenbruches von Wasser

$$x_2 = 1 + \frac{m_s M_2}{(4\pi/3) \rho_2 (r^3 - r_K^3) M_s}$$

gelangt man in erster Näherung zur folgenden Gleichung für den Sättigungsdampfdruck des Wasserdampfes an der Oberfläche eines Lösungstropfens

$$\ln \frac{p'_{1s}(r)}{p_{1s}} = \frac{B(T(r))}{r} - \frac{C}{r^3 - r_K^3} \quad (41)$$

mit dem Grenzflächeneffekt

$$B(T(r)) = \frac{2\sigma}{\rho_2 R_1 T(r)} \quad (42)$$

und der Kernaktivität

$$C = \frac{3 M_2 m_s}{4\pi \rho_2 M_s} \phi_2 \quad (43)$$

Die Oberflächenspannung  $\sigma$  und der osmotische Koeffizient  $\phi_2$  sind Funktionen des Molenbruches  $x_2$  und werden chemischen Tabellen entnommen

In der Abbildung 3. wird die KÖHLERSche relative Feuchtigkeit über einem Lösungstropfen

$$U'(r) = \frac{p'_{1s}(r)}{p_{1s}} \approx 1 + \frac{B(T(r))}{r} - \frac{C}{r^3 - r_K^3} \quad (44)$$

als Funktion des Tropfenradius dargestellt und mit dem Sättigungsverhältnis

über einem reinen Wassertropfen verglichen.

Man nennt den Tropfenradius, für den die KÖHLERSche relative Feuchtigkeit maximal wird:  $\frac{dU'(r)}{dr} = 0$ ,  $\frac{d^2U'(r)}{dr^2} < 0$  den kritischen Grenzradius

$$(45) \quad r_{KR} = [3C/B(T(r))]^{1/2},$$

weil er Kondensationskerne ( $r < r_{KR}$ ) von Wolkentropfen ( $r > r_{KR}$ ) trennt.

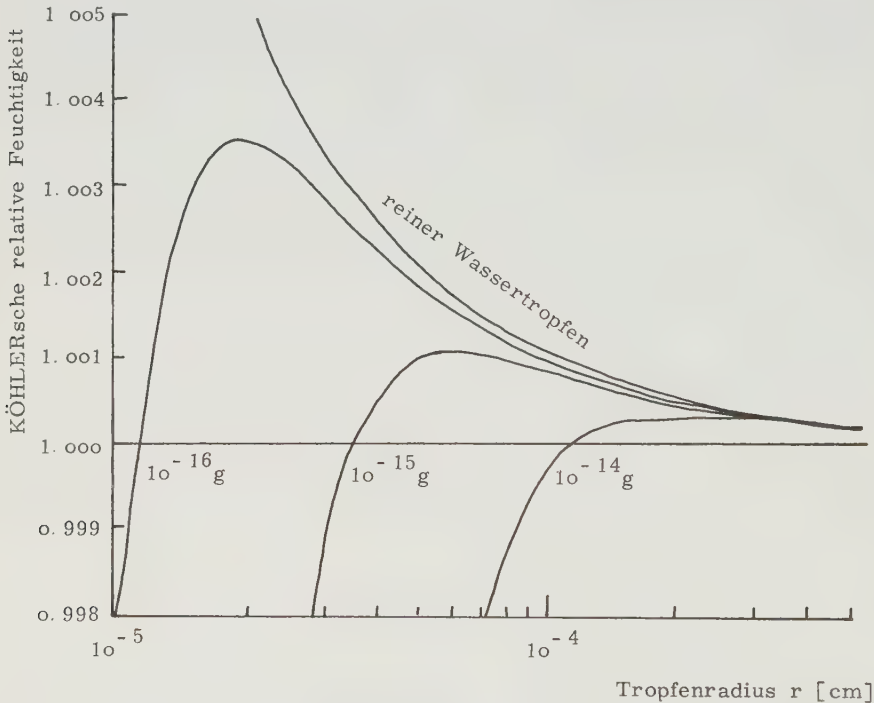


Abb. 3: KÖHLERSche Gleichgewichtskurven am Beispiel von Lösungstropfen, die die angegebenen NaCl-Mengen gelöst enthalten.

Wenn die relative Feuchtigkeit  $U > 1$  der Atmosphäre größer ist als die KÖHLERSche  $U'(r)$  an der Tropfenoberfläche, dann wachsen sowohl Kerne als auch Tropfen; wird dagegen  $1 < U \leq U'(r)$ , dann können sich nur noch die Wolkentropfen vergrößern, während die größeren Kerne wieder verdampfen müssen. Wird  $U$  jedoch kleiner 1, dann verdampfen auch die Wolkentropfen. Die kritische maximale KÖHLERSche relative Feuchtigkeit ist unter

Vernachlässigung des Kernvolumens gleich

$$U^1(r_{KR}) = 1 + \frac{B(T(r))}{r_{KR}} - \frac{C}{r_{KR}^3} = 1 + \left(\frac{4B^3}{27C}\right)^{1/2} \quad (46)$$

### 2.3.3 Die Temperatur an der Tropfenoberfläche

Der Sättigungsdampfdruck an der Oberfläche eines Lösungstropfens hängt von der dort herrschenden Temperatur ab; sie ergibt sich aus der Wärmebilanz im thermodynamischen System Tropfen-Feuchtluft

Die Wärmeänderung eines wachsenden homogenen Lösungstropfens mit der Wärmekapazität  $c_2^1$  und der Masse  $m_2^1(r)$ :

$$\frac{D}{Dt} Q_2(r) = \frac{D}{Dt} c_2^1 m_2^1 T_2(r) \quad (47)$$

erfolgt aufgrund

1. eines FOURIERSchen Wärmeflusses im Kontinuumsbereich des quasistationären Temperaturfeldes um den Tropfen;
2. eines KNUDSENSchen Wärmeflusses durch die kinetische Grenzschicht um den Tropfen;
3. einer Erwärmungsrate an der Tropfenoberfläche durch die freiwerdende Phasenumwandlungswärme.

Der FOURIERSche Wärmefluß in der Entfernung  $\lambda$  von der Tropfenoberfläche

$$\frac{D}{Dt} Q_M(r+\lambda) = 4\pi K \frac{Nu}{2} (r+\lambda) (T_M(\infty) - T_M(r+\lambda)) \quad (48)$$

enthält die molekulare thermische Leitfähigkeit  $K$  der Feuchtluft und berücksichtigt mit  $Nu/2$  den konvektiven Wärmeübergang am fallenden Tropfen.

Dabei stellt

$$Nu = 2 + 0.60 Re^{1/2} Pr^{1/3}$$

die NUSSELTsche Wärmeübergangszahl dar  $\left( Re = \frac{2\rho_M V r}{\eta_M}, Pr = \frac{\eta_M}{\rho_M K} \right)$ .

In der kinetischen Grenzschicht um den Tropfen setzt man analog zum Massenfluß für den Wärmefluß an der Oberfläche

$$\frac{D}{Dt} Q_M(r) = 4\pi r^2 \Psi(\beta) (T_M(r+\lambda) - T_M(r)) \quad , \quad (49)$$

wobei  $\beta$  den thermischen Akkommodationskoeffizienten und  $\Psi(\beta)$  den Oberflächenerwärmungskoeffizienten angibt. Die Berechnung von  $\Psi(\beta)$  ist Aufgabe der kinetischen Gastheorie.

Bei vorgegebenem thermischen Leitfähigkeitskoeffizienten  $K$   $Nu/2$  und Oberflächenerwärmungskoeffizienten  $\Psi(\beta)$  erhält man die Erwärmungsrate an der Tropfenoberfläche, indem man  $T_M(r+\lambda)$  aus den adaptierten Gleichungen der Wärmeflüsse

$$\frac{D}{Dt} Q_M(r) = \frac{D}{Dt} Q_M(r+\lambda)$$

eliminiert. Es ergibt sich

$$(50) \quad \frac{D}{Dt} Q_M(r) = 4\pi r K \frac{Nu}{2} \epsilon(\beta) (T_M(\infty) - T_M(r))$$

mit

$$\epsilon(\beta) = \left[ \frac{K \frac{Nu}{2}}{\Psi(\beta) r} + \frac{r}{r+\lambda} \right]^{-1}$$

Lagern sich an der Tropfenoberfläche Wassermoleküle aus der Dampfphase an, so wird durch Phasenumwandlung die Wärmemenge

$$(51) \quad L \frac{D}{Dt} m(r) = 4\pi r D \frac{Sh}{h} L \epsilon(\alpha) (\rho_1(\infty) - \rho_1(r))$$

frei.

Insgesamt kann für ein wachsendes homogenes Lösungströpfchen folgende Wärmebilanz

$$(52) \quad \begin{aligned} c'_2 m'_2 \frac{D}{Dt} T_2(r) &= 4\pi r K \frac{Nu}{2} \epsilon(\beta) (T_M(\infty) - T_M(r)) + \\ &+ 4\pi r D \frac{Sh}{2} L \epsilon(\alpha) (\rho_1(\infty) - \rho_1(r)) \end{aligned}$$

aufgestellt und daraus die Temperatur an der Tropfenoberfläche zu

$$T_M(r) = T_M(\infty) + \frac{DL Sh}{K Nu} \frac{\epsilon(\alpha)}{\epsilon(\beta)} (\rho_1(\infty) - \rho_1(r)) - \frac{c'_2 \rho'_2 r^2}{3 K \frac{Nu}{2} \epsilon(\beta)} \frac{D}{Dt} T_2(r)$$

bestimmt werden. Dennoch erfolgt die Wärmeaufnahme des homogenen Tropfens im allgemeinen so rasch, daß eine Verzögerung in der Einstellung der Gleichgewichtstemperatur

$$(53) \quad T_M(r) = T_M(\infty) + \frac{DL}{K} \frac{Sh}{Nu} \frac{\epsilon(\alpha)}{\epsilon(\beta)} (\rho_1(\infty) - \rho_1(r))$$

nicht ins Gewicht fällt.

### 2.3.4 Die HOWELLSche Gleichung für das Wachstum von Lösungstropfen

Nun kann man die Wachstumsgeschwindigkeit eines Lösungstropfens angeben. Dazu setzt man in die BRADLEYsche Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} m(r) &= 4\pi r D \frac{Sh}{2} \epsilon(\alpha) (\rho_1(T_M(\infty)) - \rho_1(T_M(r))) \\ &= \frac{4\pi r D \frac{Sh}{2} \epsilon(\alpha)}{R_1} \left( U \frac{p_{1s}(T_M(\infty))}{T_M(\infty)} - U'(r) \frac{p'_{1s}(T_M(r))}{T_M(r)} \right) \end{aligned}$$

die CLAUSIUS-CLAPEYRONsche Abhängigkeit des Sättigungsdampfdruckes von der Temperatur

$$\begin{aligned} p_{1s}(T_M(r)) &= p_{1s}(T_M(\infty)) \exp \left( \frac{L}{R_1} \left( \frac{1}{T_M(\infty)} - \frac{1}{T_M(r)} \right) \right) \\ &\approx p_{1s}(T_M(\infty)) \left( 1 + \frac{L}{R_1 T_M^2(\infty)} (T_M(r) - T_M(\infty)) \right) \end{aligned}$$

ein, wobei man als Temperatur an der Tropfenoberfläche den Wert der Gleichgewichtstemperatur

$$T_M(r) = T_M(\infty) + \frac{L}{4\pi r K \frac{Nu}{2} \epsilon(\beta)} \frac{D}{Dt} m(r)$$

verwendet, und gelangt nach einigen Umformungen unter Berücksichtigung von  $T_M(\infty)/T_M(r) \approx 1$  zur HOWELLSchen Tropfenwachstumsgleichung

$$\frac{D}{Dt} m(r) = 4\pi r D \frac{Sh}{2} \epsilon(\alpha) \left[ 1 + \frac{DL^2 Sh \epsilon(\alpha) \rho_{1s}(T_M(\infty))}{K Nu \epsilon(\beta) R_1 T_M^2(\infty)} U'(r) \right]^{-1} \rho_{1s}(T_M(\infty)) (U - U'(r))$$

in der

(54)

$$U'(r) \approx 1 + \frac{B(T_M(r))}{r} - \frac{C}{r^3}$$

die KÖHLERSche relative Feuchtigkeit bedeutet.

## 2.4 Koagulation und Zerfall von Wolkentropfen

### 2.4.1 Die Koagulations- und Zerfallsgleichung

Die Anzahldichteverteilung der Wolkentropfen wird nicht nur durch Wasserdampfaustausch mit der Feuchtluft verändert, sondern auch durch Umstrukturierungen in dem Tropfenspektrum, wobei jedoch die Gesamtwassermasse

erhalten bleibt.

Im folgenden soll die zeitliche Entwicklung der Anzahldichteverteilung  $f(m, t)$  unter dem Einfluß von Koagulation und Tropfenzerfall untersucht werden. Dazu bestimmt man die Änderung der Teilchenzahl eines beliebig herausgegriffenen Massenintervalls  $(m, m+dm)$  und überlegt sich, wieviele Teilchen durch Koagulation und Zerfall innerhalb des Teilchensspektrums in dieses Intervall hineingelangen oder aus ihm verschwinden.

Die Koagulationsfunktion  $K(m', m)$  wird unter der Annahme eingeführt, daß die mittlere Anzahl von Zusammenstößen zwischen Teilchen aus  $(m', m'+dm')$  und jenen aus  $(m, m+dm)$  während des Zeitintervalls  $dt$  gleich

$$K(m', m) f(m', t) dm' f(m, t) dm dt$$

ist. Die Koagulationsfunktion ist positiv und symmetrisch:

$$K(m', m) = K(m, m').$$

Die Zerfallsfunktion  $Z(m', m)$  wird so definiert, daß

$$Z(m', m) f(m', t) dm' dm dt$$

die mittlere Zerfallshäufigkeit bedeutet, mit der Teilchen aus  $(m', m'+dm')$  während der Zeit  $dt$  beim Zerfall in das Massenintervall  $(m, m+dm)$  gelangen. Sie hat die Eigenschaft

$$Z(m', m) = \begin{cases} \geq 0, & \text{wenn } m \leq m' \\ = 0, & \text{wenn } m > m' \end{cases}$$

und es gilt:

$$\int_0^{m'} Z(m', m) m dm \leq m'.$$

Ein Teilchen der Masse  $m$  kann nur entstehen, wenn

1. zwei Teilchen mit den Massen  $m'$  und  $m - m'$  miteinander koagulieren ( $0 \leq m' \leq m$ ) oder wenn
2. größere Teilchen mit der Masse  $m'$  zerfallen ( $m \leq m' < \infty$ ).

Die mittlere Erzeugungsrate der Teilchendichte im Massenintervall  $(m, m+dm)$  ist demnach gleich

$$\int_0^{m/2} K(m', m - m') f(m', t) f(m - m', t) dm' + \int_m^{\infty} Z(m', m) f(m', t) dm'.$$

Andererseits kann ein Teilchen mit der Masse  $m$  nur verschwinden, wenn es

1. mit irgendeinem anderen Teilchen  $m'$  zusammenstößt ( $0 \leq m' < \infty$ ) oder wenn es
2. zerfällt ( $0 \leq m' \leq m$ ).

Folglich ist die mittlere Vernichtungsrate der Teilchendichte  $f(m, t)$  im Massenintervall  $(m, m+dm)$  gleich

$$f(m, t) \int_0^{\infty} K(m, m') f(m', t) dm' + \frac{f(m, t)}{m} \int_0^m m' Z(m, m') dm'.$$

Insgesamt erhält man die zeitliche Änderung der Teilchendichteverteilung aus der Integrodifferentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f(m, t) = & \int_0^{m/2} K(m', m - m') f(m', t) f(m - m', t) dm' - \\ & - f(m, t) \int_0^{\infty} K(m, m') f(m', t) dm' + \\ & + \int_m^{\infty} Z(m', m) f(m', t) dm' - \\ & - \frac{f(m, t)}{m} \int_0^m Z(m, m') m' dm' \end{aligned} \quad (55)$$

## 2.4.2 Koagulationsprozesse in der Wolke

SMOLUCHOWSKI [24] hat als erster die Koagulation in einem monodispersen Hydrosol für eine diskrete Verteilung von Partikeln untersucht, eine Erweiterung auf polydisperse Systeme stammt von MÜLLER [20]. Ziel der Koagulationstheorie ist es, die Teilchengrößenverteilung als Funktion der Zeit exakt zu beschreiben. Der physikalische Prozeß der Teilchenannäherung ist in der Koagulationsfunktion enthalten und zwar koagulieren Teilchen durch

1. diffusive Annäherung infolge BROWNscher Bewegung,
2. unterschiedliche Sedimentationsgeschwindigkeiten in einem Gravitationsfeld,
3. Annäherung bei laminaren Scherströmungen und turbulenten Strömungen,
4. Anziehung bei unterschiedlichen elektrischen Ladungen.

Im folgenden soll die BROWNsche und die Gravitationskoagulation besprochen und die turbulente Koagulation erwähnt werden.

### 2.4.2.1 Die BROWNsche Koagulation

Die Koagulation von BROWNschen Teilchen beruht nach SMOLUCHOWSKI auf der Diffusion von Teilchen, die zweckmäßiger durch ihre Größe, nicht durch ihre Masse, gekennzeichnet werden. In Analogie zur Wasserdampfdiffusion wird der Fluß von  $j$ -Teilchen mit dem Radius  $r_j$  zu einem  $k$ -Teilchen mit dem Radius  $r_k$  bestimmt durch

1. einen diffusiven  $j$ -Teilchenfluß im quasistationären Teilchendichtefeld und
2. einen  $j$ -Teilchenfluß durch die kinetische Grenzschicht, die mit dem

Abstand der mittleren freien Weglänge  $\Lambda$  der einfallenden Teilchen von der Oberfläche des k-Teilchens entfernt ist.

Der j-Teilchenstrom zum ebenfalls bewegten k-Teilchen ist in der Entfernung  $r_K + \Lambda$  in quasistationärer Näherung

$$(56) \quad \frac{D}{Dt} f_J(r_K + \Lambda) = 4\pi (r_J + r_K + \Lambda) (D_J + D_K) (f_J(\infty) - f_J(r_K + \Lambda)) ,$$

wobei

$$D_J = B_J k T$$

den Diffusionskoeffizienten des j-Teilchens bei BROWNscher Bewegung darstellt und

$$B_J = \frac{V(r_J)}{m(r_J)g} = \frac{1 + A \frac{\Lambda}{r_J}}{6\pi\eta r_J}$$

die mit dem CUNNINGHAMschen Faktor  $A = 0.864$  korrigierte STOKESsche Beweglichkeit bezeichnet.

Andererseits wird der kinetische j-Teilchenfluß durch die Grenzschicht an der Oberfläche des absorbierenden k-Teilchens durch

$$(57) \quad \frac{D}{Dt} f_J(r_K) = 4\pi (r_J + r_K)^2 \Psi_{JK} f_J(r_K + \Lambda)$$

dargestellt, wobei

$$\Psi_{JK} = \frac{1}{4} \left( \frac{8kT}{\pi} \right)^{1/2} \left( \frac{1}{m(r_J)} + \frac{1}{m(r_K)} \right)^{1/2}$$

gleich einem Viertel der mittleren thermischen Geschwindigkeit der BROWNschen Teilchen ist.

Durch Adaption der beiden Teilchenflüsse

$$\frac{D}{Dt} f_J(r_K + \Lambda) = \frac{D}{Dt} f_J(r_K)$$

und Eliminieren von  $f_J(r_K + \Lambda)$  gelangt man zur Vernichtungsrate von j-Teilchen

$$(58) \quad \frac{D}{Dt} f_J(r_K) = 4\pi (r_J + r_K) (D_J + D_K) \epsilon_{JK} f_J(\infty)$$

infolge Anlagerung an das k-Teilchen, mit

$$\epsilon_{JK} = \left[ \frac{D_J + D_K}{\Psi_{JK} (r_J + r_K)} + \frac{r_J + r_K}{r_J + r_K + \Lambda} \right]^{-1}$$

Folglich definiert man

$$K(r_K, r_J) = 4\pi(r_J + r_K)(D_J + D_K)\epsilon_{JK} \quad (59)$$

als Koagulationsfunktion bei BROWNscher Teilchenbewegung.

#### 2.4.2.2 Die Gravitationskoagulation

Die Koagulation von Teilchen unter Einwirkung des äußeren Gravitationsfeldes erfolgt aufgrund der unterschiedlichen Fallgeschwindigkeit verschieden großer Teilchen

Ein großes Teilchen vom Radius  $r_K$ , das sich relativ zu kleineren Partikeln vom Radius  $r_J$  bewegt, fällt in der Zeiteinheit  $dt$  die Strecke  $(v_K - v_J) dt$ .

Dabei sind  $v_K$  und  $v_J$  die Fallgeschwindigkeiten der erwähnten Teilchen. Das  $k$ -Teilchen durchströmt während seines Falls einen Zylinder mit dem Volumen

$$\pi(r_K + r_J)^2 (v_K - v_J) dt.$$

Da die Anzahl der  $j$ -Teilchen  $f(r_J, t)$  ist, werden vom  $k$ -Teilchen

$$\frac{D}{Dt} f(r_J) = E(r_K, r_J) \pi(r_K + r_J)^2 (v_K - v_J) f(r_J) \quad (60)$$

$j$ -Teilchen eingefangen und das entspricht dem  $j$ -Teilchenstrom, der auf die absorbierende Kugelfläche vom Radius  $r_K$  trifft. Folglich definiert man

$$K(r_K, r_J) = E(r_K, r_J) \pi(r_K + r_J)^2 (v_K - v_J) \quad (61)$$

als Koagulationsfunktion.

Der Kollisionswirkungsgrad  $E(r_K, r_J)$  muß der Bedingung

$$0 \leq E(r_K, r_J) \leq 1$$

genügen. Wenn das größere  $k$ -Teilchen relativ zu den kleineren  $j$ -Teilchen fällt, dann werden diese hydrodynamisch um das größere Teilchen herumgeführt und nur ein Bruchteil der im Kollisionszylinder befindlichen  $j$ -Teilchen gelangt zum absorbierenden  $k$ -Teilchen. Es stoßen nur  $j$ -Teilchen mit dem  $k$ -Teilchen zusammen, die innerhalb der streifenden Trajektorien liegen (Abbildung 4.)

Demnach definiert man den Kollisionswirkungsgrad durch

$$E(r_K, r_J) = \frac{R^2}{(r_K + r_J)^2}$$

Manchmal verwendet man das Radienverhältnis

$$p = r_J / r_K$$

und definiert einen linearen Kollisionswirkungsgrad

$$L(r_K, r_J) = \frac{R}{r_K} ,$$

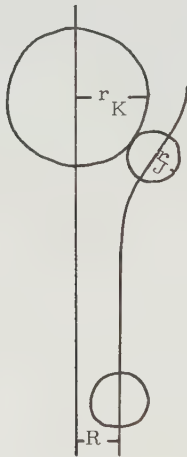


Abb. 4: Berührungstrajektorie für einen Tropfen mit dem Radius  $r_J$ , der von einem größeren fallenden Tropfen vom Radius  $r_K$  eingefangen wird.

so daß

$$E(r_K, r_J) = \left( \frac{L(r_K, r_J)}{1 + p} \right)^2$$

wird. Die Bestimmung dieses Einfangkoeffizienten  $E(r_K, r_J)$  ist ein Problem, das in der Hydrodynamik der Aerosolfluids gelöst wird. Derartige Berechnungen und experimentelle Ergebnisse für Wassertropfen hat KÖENIG [15] in einem Diagramm zusammengefaßt, in dem die linearen Kollisionswirkungsgrade als Funktion der Tropfengröße dargestellt sind (Abb. 5.)

### 2.4.2.3 Die turbulente Koagulation

Die Koagulation von Teilchen in turbulenten Strömungen muß ebenfalls in der Hydrodynamik der Aerosolfluids untersucht werden. Für den turbulent-diffusiven j-Partikelstrom auf eine absorbierende Kugelfläche vom Radius  $r_K$  soll lediglich die Formel von SAFFMAN & TURNER [21]

$$\frac{D}{Dt} f(r_J) = 1.30 \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} (r_J + r_K)^3 f(r_J) \quad (62)$$

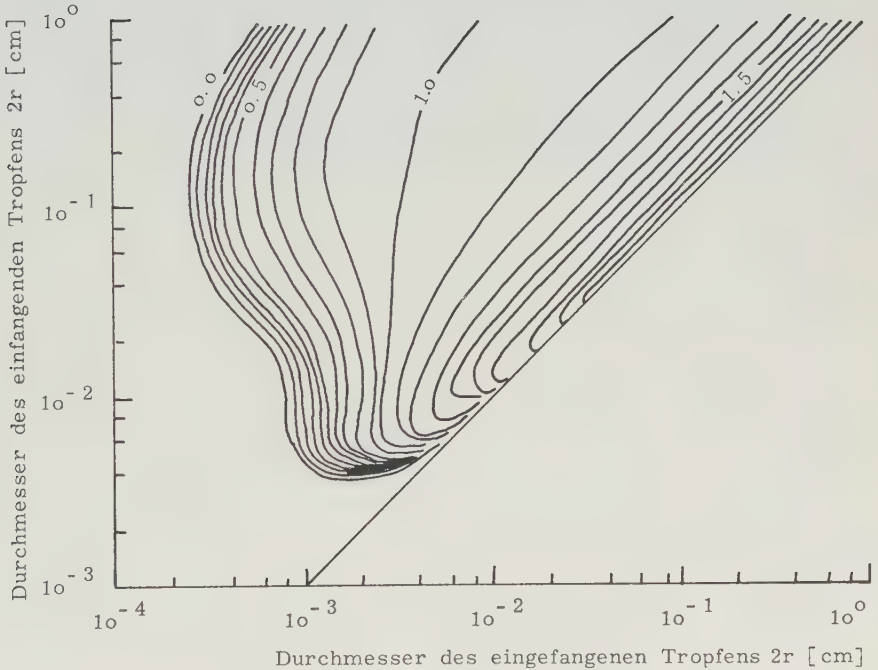


Abb. 5: Lineare Kollisionseffizienzen als Funktion der Tropfengröße bei Gravitationskoagulation.

erwähnt werden, in der  $\epsilon$  die Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten Energie und  $\nu$  die kinematische Zähigkeit der Luft bedeuten. Als Koagulationsfunktion definiert man

$$K(r_K, r_J) = 1.30 \left( \frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/2} (r_K + r_J)^3 \quad (63)$$

## 2.4.3 Der Tropfenzerfall

Durch Koagulation werden immer größere Tropfen erzeugt; wenn die Grösse von Regentropfen erreicht ist, wächst die Wahrscheinlichkeit, daß die Tropfen mechanisch instabil werden und zerfallen. Zweckmäßigerweise zerlegt man die Zerfallsfunktion in zwei Faktoren, nämlich

1. in die Zerfallswahrscheinlichkeit  $P(m')$ , so daß  $P(m') dt$  die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der ein Tropfen der Masse  $m'$  in der Zeit  $dt$  zerfällt;
2. in die Anzahldicke  $Q(m', m)$  der zerfallenden Teilchen, so daß  $Q(m', m) dm$  die Anzahl von Tropfen der Masse  $(m, m+dm)$  angibt, die beim Zerfall eines Tropfens der Masse  $m'$  entstehen.

Man setzt also für die Zerfallsfunktion

$$Z(m', m) = Q(m', m) P(m'),$$

beachtet, daß aus Gründen der Massenerhaltung

$$m' = \int_0^{m'} Q(m', m) dm$$

gelten muß und gelangt zur Zerfallsgleichung

$$(64) \quad \frac{\partial}{\partial t} f(m, t) = \int_m^\infty Q(m', m) P(m') f(m', t) dm' - f(m, t) P(m).$$

Für die Funktionen  $P(m)$  und  $Q(m', m)$  liegen Messungen von KOMABA-YASI [16] vor:

1. Die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Tropfen der Masse  $m'(r')$  zerfällt, ist angenähert

$$P(m') = 2.94 \cdot 10^{-7} \exp(35.4 r') [\text{sec}^{-1}].$$

2. Beim Zerfall eines Tropfens der Masse  $m'(r')$  entstehen Teilchen der Masse  $m(r)$  mit der Anzahldicke

$$Q(m', m) = S(r') \left(\frac{r'}{r}\right)^3 \exp(-15.6 r'),$$

wobei der Faktor  $S(r')$  aus der Bedingung, daß beim Zerfall die Gesamtmasse erhalten bleiben muß, zu bestimmen ist.

## 2.5 Die Fallgeschwindigkeit von Wolkentropfen

### 2.5.1 Bewegungsgleichung eines Teilchens

Sowohl für die räumliche Divergenz der Anzahldichtefunktion als auch für die Gravitationskoagulation in der Anzahldickeerzeugung benötigt man die Geschwindigkeit der einzelnen Tropfen. Bei geringer Tropfenzahl können

Wechselwirkungen zwischen den Teilchen vernachlässigt werden und es kann die Bewegung eines einzelnen Partikels in einem fluiden System für sich untersucht werden.

Die allgemeine Bewegungsgleichung eines Tropfens vom Radius  $r$ , der in der bewegten Feuchtluft unter Einwirkung eines Gravitationsfeldes  $g$  fällt, ist

$$\frac{4\pi}{3} r^3 \left( \rho_r \frac{d\mathbf{v}_r}{dt} - \rho_M \frac{d\mathbf{v}_M}{dt} \right) = \frac{4\pi}{3} r^3 g (\rho_r - \rho_M) + \mathbf{p}(r) \quad (65)$$

wobei  $\rho_r$  die Dichte des Tropfens und  $\rho_M$  die der fluiden Substanz darstellt. Das Teilchen wird unter der Wirkung der Gravitation, vermindert um den Auftrieb, beschleunigt und durch den Widerstand  $\mathbf{p}(r)$ , den es bei der Bewegung durch die Feuchtluft erfährt, verzögert.

In der Aerosolmechanik unterscheidet man Partikelströmungen bei kleinen und bei großen REYNOLDSschen Zahlen. Die REYNOLDSsche Zahl für ein Teilchen mit dem Radius  $r$  in einer fluiden Mischung mit der dynamischen Zähigkeit  $\eta_M$  ist durch

$$\text{Re}(r) = \frac{2r |\mathbf{v}_r| \rho_M}{\eta_M}$$

definiert.

## 2.5.2 Der fluide Widerstand bei kleinen REYNOLDSschen Zahlen

Bei kleinen REYNOLDSschen Zahlen ist der Widerstand, den die Kugel bei der Bewegung in der fluiden Mischung verspürt, durch den BASSET-BOUSSINESQ-OSEENschen Ansatz

$$\mathbf{p}(r) = \frac{2\pi}{3} r^3 \left( \frac{d\mathbf{v}_r}{dt} - \frac{d\mathbf{v}_M}{dt} \right) + 6\pi\eta r (\mathbf{v}_r - \mathbf{v}_M) + 6r^2 (\pi\eta_M\rho_M)^{1/2} \int_0^t \frac{\frac{d\mathbf{v}_r(\delta)}{dt} - \frac{d\mathbf{v}_M(\delta)}{dt}}{\sqrt{t-\delta}} d\delta \quad (66)$$

gegeben (FUCHS [9]). Er setzt sich aus

1. dem Widerstand eines idealen fluiden Systems unter der beschleunigten Bewegung des Teilchens,
  2. dem Widerstand eines zähen fluiden Systems bei konstanter Geschwindigkeit des Teilchens und
  3. dem Widerstand eines zähen fluiden Systems unter beschleunigter Teilchenbewegung
- zusammen.

Für schwere Teilchen ( $\rho_r/\rho_M \gg 1$ ) kann der Trägheitswiderstand und der BASSETTsche Integralterm vernachlässigt werden und es bleibt der STOKESsche fluide Widerstand

(67)

$$p(r) = 6\pi\eta_M r (W_r - v_M)$$

übrig. Im Fall einer geringen Fluidbewegung ( $v_M \approx 0$ ) gilt die STOKESsche Bewegungsgleichung für die Vertikalgeschwindigkeit  $V_r$  der Teilchen in Richtung des Schwerfeldes

$$m(r) \frac{dV_r}{dt} = m(r)g - 6\pi\eta_M r V_r ,$$

deren Lösung zu

$$V_r = V_{r,st} (1 - e^{-t/\tau})$$

gefunden wird und in der

$$\tau = \frac{m(r)}{6\pi\eta_M r} = \frac{2\rho_r r^2}{g\eta_M}$$

die Relaxationszeit und

$$V_{r,st} = \tau g$$

die stationäre oder freie Fallgeschwindigkeit des Teilchens vom Radius  $r$  bedeutet.

Definiert man eine Widerstandsfunktion  $C(Re)$  gemäß

(68)

$$p(r) = \frac{\pi r^2}{2} \rho_M V_r^2 C(Re)$$

dann ergibt sich der STOKESsche Widerstandskoeffizient zu

$$C(Re)_{STOKES} = \frac{24}{Re(r)} .$$

Die kinetische Grenzschicht um den fallenden Tropfen von der Dichte der mittleren freien Weglänge  $\lambda$  der Fluidmoleküle, innerhalb der ein kinetischer Impulstransport vonstatten geht, kann im STOKESschen Widerstand der fluiden Mischung berücksichtigt werden:

$$p(r) = 6\pi\eta_M r V_r (1 + A \frac{\lambda}{r}) ,$$

wobei  $A = 0.864$  den CUNNINGHAMschen Korrekturfaktor darstellt, der von der Reflexion der Fluidmoleküle von der Tropfenoberfläche abhängt.

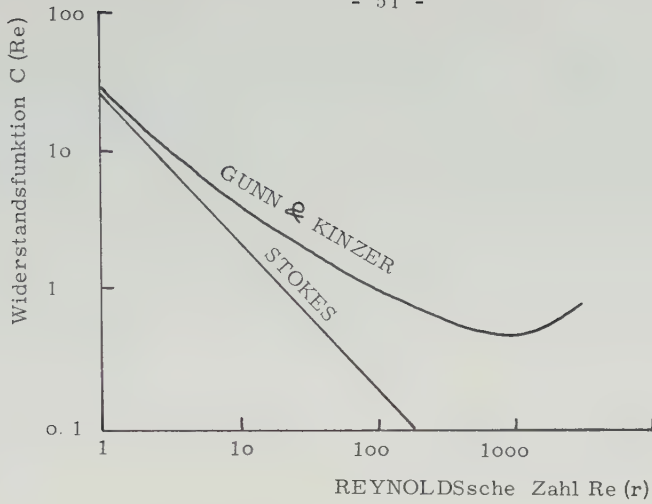


Abb. 6: Die Widerstandsfunktion  $C(Re)$  für Wassertropfen nach Messungen von GUNN & KINZER verglichen mit dem STOKESschen Widerstand

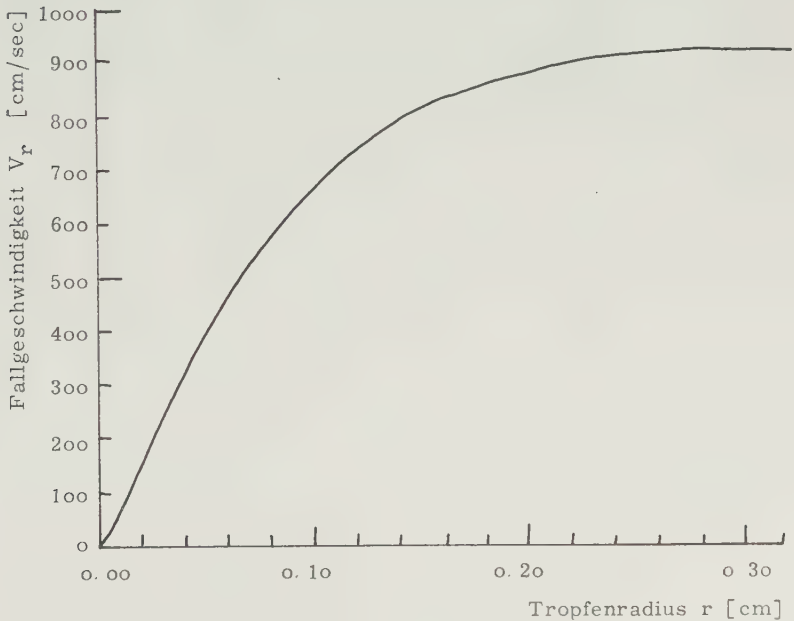


Abb. 7: Fallgeschwindigkeiten der Wassertropfen in Luft nach Messungen von GUNN & KINZER.

### 2.5.3 Der fluide Widerstand bei großen REYNOLDSschen Zahlen

Wenn die REYNOLDSsche Zahl  $Re(r) > 1$  wird, kann die Partikelbeschleunigung in der Bewegungsgleichung des Teilchens vernachlässigt werden und der Widerstand ist durch

$$p(r) = m(r) g$$

gegeben, so daß die freie Fallgeschwindigkeit gleich

$$V_r = \left[ \frac{2 m(r) g}{\pi r^2 \rho_M C(Re)} \right]^{1/2}$$

wird.

Die Widerstandsfunktion  $C(Re)$  für fallende Wassertropfen entnimmt man empirischen Widerstandskurven (Abbildung 6.) oder man verwendet die Geschwindigkeitsmessungen fallender Tropfen von GUNN & KINZER [10] und bringt eventuelle Korrekturen für verschiedene Luftdichten an (Abbildung 7.).

### 2.6 Erzeugungs- und Übergangsraten des Tropfensystems in der Wolke

Nach der ausführlichen Beschreibung der Mikroprozesse, die für die Anzahldichteerzeugung innerhalb der polydispersen Wassersubstanz von Bedeutung sind, kann man die Erzeugungs- und Übergangsraten des Wassers innerhalb der Wolkenmischung angeben.

Die Erzeugungsraten von Masse, Impuls und innerer Energie des Tropfensystems lauten

$$(69) \quad \begin{aligned} \dot{\rho}_2^* &= \int_M f(m) \frac{Dm}{Dt} dm - \left[ m f(m) \frac{Dm}{Dt} \right]_{\partial M} \\ \dot{\rho}_2^* \bar{v}_2 &= \int_M f(m) \bar{v}(m) \frac{Dm}{Dt} dm - \left[ m f(m) \bar{v}(m) \frac{Dm}{Dt} \right]_{\partial M} \\ \dot{\rho}_2^* \left( \frac{u_2^*}{2} + h_2 \right) &= \int_M f(m) \left( \frac{u^2(m)}{2} + h_2 \right) \frac{Dm}{Dt} dm - \left[ m \left( \frac{u^2(m)}{2} + h_2 \right) f(m) \frac{Dm}{Dt} \right]_{\partial M} \end{aligned}$$

Die Übergangsraten von Impuls und Wärme zwischen dem Tropfensystem und der Feuchtluft sind

$$(70) \quad \begin{aligned} P_2 &= g \int_M m f(m) dm \\ \epsilon_2 &= \int_M f(m) \frac{DQ(m)}{Dt} dm \end{aligned}$$

## 2.7 Überblick über Veränderungen des Partikelsystems im Verlauf der Wolkenentwicklung

Es ist nun an der Zeit, ganz konkret das polydisperse System zu beschreiben, das die Mikrostruktur der Wasserwolken darstellt. Die Eigenschaften dieses Partikelsystems ändern sich mit zunehmender Größe der Teilchen und es entwickeln sich - wenn dem mikrostrukturierten fluiden System genügend Wasserdampf zur Verfügung steht - aus den hygroskopischen Aerosolteilchen Wolkentropfen, die zu Regentropfen anwachsen können. Prozesse, die den Ablauf der Wolkenentwicklung beeinflussen, hängen entscheidend vom Dispersionsgrad des Partikelsystems ab und sind in Tabelle 4 aufgeführt. Dieses Diagramm stellt nicht den Anspruch vollständig zu sein, zumal bei den Teilchen weder die kristalline Eisphase noch elektrische Ladungen berücksichtigt werden.

|                                                               | PARTIKELRADIUS r [cm] |                  |                  |                  |                  |                  |                   |                 |
|---------------------------------------------------------------|-----------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|-------------------|-----------------|
|                                                               | 10 <sup>-7</sup>      | 10 <sup>-6</sup> | 10 <sup>-5</sup> | 10 <sup>-4</sup> | 10 <sup>-3</sup> | 10 <sup>-2</sup> | 10 <sup>-1</sup>  | 10 <sup>0</sup> |
| DISPERSES SYSTEM                                              | kolloiddispers        |                  |                  |                  | grobdispers      |                  |                   |                 |
| TEILCHENTYP                                                   | Aerosolteilchen       |                  |                  |                  |                  |                  |                   |                 |
|                                                               | Aitkenkerne           |                  | Wolkenkerne      |                  |                  |                  |                   |                 |
|                                                               |                       |                  |                  |                  | Wolkentropf.     |                  | Regentropf.       |                 |
| BESCHAFFENHEIT<br>DER TEILCHEN                                | feste Teilch.         |                  |                  |                  |                  |                  |                   |                 |
|                                                               | Lösungsströpfchen     |                  |                  |                  | Wassertropfen    |                  |                   |                 |
| BEWEGUNG<br>DER TEILCHEN                                      | BROWNsche Beweg.      |                  |                  |                  | Sedimentation    |                  |                   |                 |
|                                                               |                       |                  |                  |                  |                  |                  |                   |                 |
| VORHERRSCHENDE<br>KOAGULATIONSART<br>ZWISCHEN<br>DEN TEILCHEN | BROWNsche Koag.       |                  |                  |                  |                  |                  |                   |                 |
|                                                               |                       |                  |                  |                  | turbulente K.    |                  | Gravitationskoag. |                 |

Tab. 4: Typische Eigenschaften des atmosphärischen Partikelsystems ( ohne Eisphase und elektrische Effekte ) als Funktion der Partikelgröße

Die Anzahldichtevertelung von atmosphärischen Aerosolteilchen kann nach JUNGE [ 13 ] im Größenbereich 10<sup>-5</sup> ... 10<sup>-3</sup> cm annähernd durch

$$f(r) = \gamma r^{-4} \text{ [cm}^{-4}\text{]}$$

wiedergegeben werden, wobei die Konstante  $\gamma$  den Typ der Verteilung, ob kontinental oder maritim, charakterisiert. Das atmosphärische Aerosol

setzt sich überwiegend aus Mischkernen zusammen; das sind Agglomerationen von festen, unlöslichen, teilweise benetzbaren Stoffen und wasserlöslichen Substanzen. Aus der Menge der Aerosolteilchen können sich nur die kondensationsaktiven Wolkenkerne zu Wolkentropfen entwickeln, nämlich jene hygroskopischen Teilchen, deren kritische KÖHLERsche relative Feuchtigkeit niedriger als die Luftfeuchtigkeit liegt:

$$U'(r_{KR}) = 1 + \left(\frac{4B^3}{27C}\right)^{1/2} < U.$$

Führt man daher die Transformation

$$f(r) \longrightarrow f(U'(r_{KR}))$$

für verschiedene Kernaktivitäten C aus, dann erhält man aus dem Größenspektrum der Aerosolteilchen ein Feuchtespektrum der Wolkenkerne, das man anschließend in eine Verteilung kritischer Wolkenkerngrößen überführen kann:

$$f(U'(r_{KR})) \longrightarrow f(r_{KR}).$$

An der so gewonnenen Größenverteilung der Wolkenkerne setzen die wolkenphysikalischen Prozesse wie Phasenumwandlungen und Koagulationen ein. Die erforderliche Untersuchung der chemischen Zusammensetzung von Wolkenkernen muß von der Aerosolchemie geleistet werden, es soll hier nur erwähnt werden, daß die Salze  $(NH_4)_2SO_4$  und NaCl häufige Bestandteile kontinentaler wie maritimer Wolkenkerne sind.

Die aktiven Lösungsströpfchen wachsen im Wasserdampfgebiet der Wolke zu immer größeren Tropfen heran, die sich durch Koagulation rasch weiter vergrößern; man spricht in diesem Zusammenhang vom Einsetzen einer Phasen- und einer kolloidalen Instabilität. Gelangen die Tropfen in den Größenbereich von Regentropfen, dann tritt Tropfenzerfall als mechanische Instabilität hinzu. Die Wolkentropfenverteilungen hängen sowohl von der Struktur als auch vom Entwicklungsstadium der Wolke ab.

Es liegen zahlreiche Messungen über die Regentropfengrößenverteilung am Erdboden vor. Eine mittlere Regenstruktur kann durch die exponentiell verlaufende MARSHALL-PALMERsche Verteilung

$$f(r) = f(0) \exp(-\Lambda r)$$

gekennzeichnet werden, in der  $f(0)$  eine Konstante und  $\Lambda$  einen von der Regenfallintensität oder dem Regenfluß

$$I = \int f(r) m(r) w(r) dr$$

abhängigen Parameter darstellt. Die von MARSHALL und PALMER analysierte Verteilung der Regentropfen gilt für  $f(0) = 0.08 \text{ cm}^{-4}$  und

$$\Lambda = 41 I^{-0.21} \text{ cm}^{-1}.$$

Einen ersten Einblick in die Größen, die einen Regen kennzeichnen, ge-

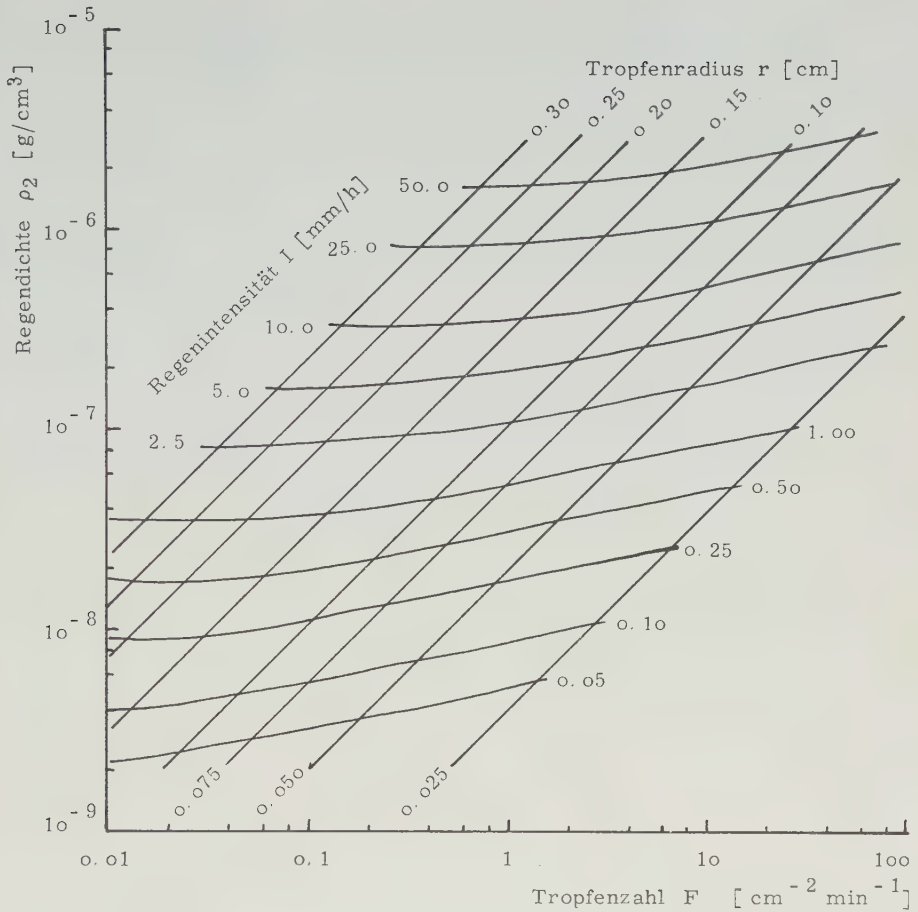


Abb. 8: DIEM'sches Diagramm des idealen Regens.

winnt man bei der Betrachtung des von DIEM [3] konstruierten Diagramms eines idealen monodispersen Regens (Abbildung 8). Bei einem vorgegebenem Tropfenradius  $r$  und einer bekannten Tropfenzahl  $F$  läßt sich der dazugehörige Wassergehalt  $\rho_2$  und die am Erdboden zu erwartende Intensität  $I$  des Regens entnehmen. Da die Linien gleicher Intensität sehr flach liegen, kann eine bestimmte Regenintensität bei nahezu gleichem Regenwassergehalt durch wenige große oder viele kleine Tropfen bedingt sein. Man kann mit diesem Diagramm eine Größenordnungsabschätzung des zu erwartenden Regenfalls vornehmen, wenn man den Tropfenradius aus einer tatsächlichen Regentropfenverteilung aufsucht, dem die größte Massendichte  $f(r)$   $m(r)$  entspricht.

### 3. WECHSELWIRKUNG ZWISCHEN MIKRO- UND MAKROSTRUKTUR IM MODELL EINES KONVEKTIVEN REGENFALLS UND IHRE PARAMETRISIERUNG

#### 3.1 Der Einfluß der Tropfenverteilung auf den Ablauf eines Regenfalls

Die Wirkung eines polydispersen Partikelsystems durch Massen-, Impuls- und Wärmeaustausch auf ein fluides System innerhalb einer heterogenen Mischung wird nun am Beispiel konvektiver Regenfälle untersucht. Im Verlauf der Wolkenentwicklung bildet sich eine Regentropfenverteilung, die aus der Wolke in eine Atmosphärenschicht mit einem bestimmten feucht-thermischen Aufbau fällt. Beim Herabsinken werden Mikroprozesse wie Verdampfen, Koagulieren und Zerfallen wirksam und verändern die Regenstruktur. Die Regentropfenverteilung bestimmt die Erzeugungs- und Übergangsraten in den Bilanzgleichungen der Feuchtluft. Die gegenseitige Wechselwirkung zwischen der dispersen Regenstruktur und der gasförmigen Feuchtluft veranlaßt eine zeitliche Veränderung von Regentropfengrößenverteilung, von Wasserdampfdichte, Vertikalgeschwindigkeit und Temperatur der feuchten Luft. Eine Untersuchung konvektiver Regenfälle verlangt die Lösung eines hydrothermodynamischen Gleichungssystems, das der Beschreibung einer konvektiven Störung in der Atmosphäre angepaßt ist.

Eine vollständige Theorie mikrostrukturierter Regenfälle ist meiner Kenntnis nach bisher noch nicht ausgearbeitet worden. Untersuchungen über das Verdampfen fallender Regentropfen oder über Koagulation und Zerfall von Tropfen in den Größenverteilungen liegen zwar vor, jedoch wird die Wechselbeziehung zwischen den Tropfen und der Feuchtluft nicht berücksichtigt. Eine Ausnahme machen SYONO & TAKEDA [25], die den Einfluß verdampfender Regentropfen auf die Feuchtigkeit und Temperatur der durchfallenen Atmosphärenschicht berechnen.

Strebt man eine Beschreibung der Wechselwirkung zwischen der Regenmasse und der Atmosphäre an, durch die der Regen fällt, dann muß man geeignete Ansätze für die Erzeugungs- und Übergangsraten erstellen. Das ist gerade beim Niederschlag schwieriger als in der Wolke, da der Wasserdampfaustausch zwischen der Wassersubstanz und der Feuchtluft nicht in der Nähe des Phasengleichgewichts, also der Sättigung der Atmosphäre, verläuft, sondern er findet bei Regenfällen meist in einer stark ungesättigten Atmosphäre statt. Daher setzt KESSLER [14] für die Regenmasse eine MARSHALL-PALMERsche Tropfenverteilung an, die während des Verdampfens und Koagulierens forminvariant bleibt, so daß eine Gleichung zur Beschreibung der zeitlichen Veränderung einer Tropfenverteilung fortfällt. Verzichtet man gänzlich auf die Anwendung von Regentropfenspektren, dann muß man versuchen, die Bedeutung, welche verschiedenen Tropfenverteilungen bei gleichem Wassergehalt während ihrer Wechselwirkung mit der Feuchtluft zukommt, auf indirekte Weise zu berücksichtigen. Durch einen Vergleich der numerischen Analysen eines konvektiven Regenmodells, in dem Regen einmal als polydisperse Tropfenverteilung und zum anderen als einfache Regenmasse behandelt wird, kann man die Verlässlichkeit der Parametrisierungsansätze prüfen.

### 3.2 Bilanzgleichungen für die Feuchtluftmischung

Zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen der Wasserdampf-Luftmischung  $\mathcal{B}_M = \mathcal{B}_0 \cup \mathcal{B}_1$  und der in Tropfenform vorliegenden Wassersubstanz  $\mathcal{B}_2$  sind die Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Wärmeenergie der Feuchtluft erforderlich. Die Kopplung dieser fluiden Partialmischung mit dem Tropfensystem geschieht über Quellfunktionsraten, die im vorangegangenen Abschnitt bestimmt worden sind. Insbesondere gelten folgende Konsistenzbedingungen

1. für die Erzeugungsraten von Masse, Impuls und innerer Energie

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_1^* &= -\dot{\rho}_2^* \\ \dot{\rho}_1^* \mathbf{v}_1^* &= -\dot{\rho}_2^* \mathbf{v}_2^*\end{aligned}$$

$$\dot{\rho}_1^* \left( \frac{u_1^*}{2} + h_1^* \right) = -\dot{\rho}_2^* \left( \frac{u_2^*}{2} + h_2^* \right);$$

2. für die Übergangsraten von Impuls und Wärme

$$\mathbb{P}_M = -\mathbb{P}_2$$

$$\epsilon_M = -\epsilon_2$$

Man definiert nun in der Feuchtluftmischung  $\mathcal{B}_M$  eine Dichte

$$\rho_M = \rho_0 + \rho_1,$$

eine Geschwindigkeit

$$\mathbf{v}_M = \frac{\rho_0 \mathbf{v}_0 + \rho_1 \mathbf{v}_1}{\rho_M}$$

und Diffusionsgeschwindigkeiten für Luft  $\mathcal{B}_0$  und Wasserdampf  $\mathcal{B}_1$  ( $K = 0, 1$ )

$$\dot{\mathbf{i}}_K = \mathbf{v}_K - \mathbf{v}_M.$$

Unter Beachtung der kinematischen Identität für die Partialsubstanzen  $\mathcal{B}_0$  und  $\mathcal{B}_1$

$$\rho_M \frac{d_M \Psi_M}{dt} = \sum_{K=0}^1 \left[ \rho_K \frac{d_K \Psi_K}{dt} + (\Psi_1 - \Psi_M) \dot{\rho}_1^* - \nabla \cdot \rho_K \Psi_K \dot{\mathbf{i}}_K \right]$$

erhält man die Bilanzgleichungen für die Feuchtluft  $\mathcal{B}_M$  innerhalb der Wolkenmischung  $\mathcal{B} = \mathcal{B}_M \cup \mathcal{B}_2$  zu:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho_M + \nabla \cdot \rho_M \mathbf{v}_M &= \dot{\rho}_1^* \\
 \rho_M \frac{d_M \mathbf{v}_M}{dt} &= \nabla \cdot (\mathbf{T}_0 + \mathbf{T}_1) + \rho_M \mathbf{f}_M - \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{v}_0 \dot{\mathbf{i}}_0 + \rho_1 \mathbf{v}_1 \dot{\mathbf{i}}_1) + \\
 &\quad + \dot{\rho}_1^* (\mathbf{v}_1^* - \mathbf{v}_M) + \mathbf{p}_M \\
 \rho_M \frac{d_M h_M}{dt} &= \frac{d_0 p_0}{dt} + \frac{d_1 p_1}{dt} + \nabla \mathbf{v}_0 \cdot \mathbf{R}_0 + \nabla \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{R}_1 - \nabla \cdot \mathbf{h}_M + \\
 &\quad + \nabla \cdot (\rho_0 h_0 \dot{\mathbf{i}}_0 + \rho_1 h_1 \dot{\mathbf{i}}_1) + \dot{\rho}_1^* (h_1^* - h_M + \frac{u_1^2}{2}) + \epsilon_M
 \end{aligned}
 \tag{71}$$

mit den Quellfunktionsraten

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_1^* &= - \dot{\rho}_2^* = - \int f(m) \frac{Dm}{Dt} dm + \left[ m f(m) \frac{Dm}{Dt} \right]_{\partial M} \\
 \dot{\rho}_1^* (\mathbf{v}_1^* - \mathbf{v}_M) + \mathbf{p}_M &= - \dot{\rho}_2^* (\mathbf{v}_2^* - \mathbf{v}_M) - \mathbf{p}_2 = \\
 &= - \int f(m) (\mathbf{v}^*(m) - \mathbf{v}_M) \frac{Dm}{Dt} dm + \\
 &\quad + \left[ m (\mathbf{v}^*(m) - \mathbf{v}_M) f(m) \frac{Dm}{Dt} \right]_{\partial M} - \mathbf{g} \int m f(m) dm \\
 \dot{\rho}_1^* (h_1^* - h_M + \frac{u_1^2}{2}) + \epsilon_M &= - \dot{\rho}_2^* (h_2^* - h_M + \frac{u_2^2}{2}) - \epsilon_2 = \\
 &= - \int f(m) (h_2^* - h_M + \frac{u_2^2(m)}{2}) \frac{Dm}{Dt} dm + \\
 &\quad + \left[ m (h_2^* - h_M + \frac{u_2^2(m)}{2}) f(m) \frac{Dm}{Dt} \right]_{\partial M} - \\
 &\quad - \int f(m) \frac{DQ(m)}{Dt} dm
 \end{aligned}
 \tag{72}$$

Die Vertikalgeschwindigkeit erzeugter Tropfen von der Masse  $m(r)$  ist gleich ihrer effektiven Sinkgeschwindigkeit

$$w_2^* = \mathbf{w}^*(m) = -V_r + w_M;$$

Die gleiche Geschwindigkeit hat der beim Verdampfen eines solchen Tropfens entstehende Wasserdampf:  $w_1^* = w_2^*$ .

Die Enthalpieerzeugung bei der Umwandlung von Wasser in Dampf

$h_1^* = L_{2,1} + h_2$  und bei der Umwandlung von Dampf in Wasser  $h_2^* = L_{1,2} + h_1$  setzt sich aus der Phasenumwandlungswärme  $L = -L_{1,2} = +L_{2,1}$  und den entsprechenden spezifischen Enthalpien  $h_1 = c_{p,1} T_M + \text{const}$  und  $h_2 = c_2 T_2 + \text{const}$  zusammen. In guter Näherung gilt:

$$h_2^* - h_M + \frac{u_2^2}{2} \approx L_{1,2} = -L.$$

Jeder einzelne Tropfen wirkt in feuchter Luft als Massenquelle oder -senke und als Wärmequelle oder -senke:

$$\frac{D}{Dt} m(r) = 4\pi r D \frac{Sh}{2} \epsilon(\alpha) [\rho_1(T_M(\infty)) - \rho_1(T_M(r))]$$

$$\frac{D}{Dt} Q(m) = 4\pi r K \frac{Nu}{2} \epsilon(\beta) [T_M(\infty) - T_M(r)].$$

### 3.3 Modell zur Untersuchung konvektiver Regenfälle

Die im Verlauf der Arbeit gewonnenen Kenntnisse über das Verhalten thermodynamischer Systeme, die aus einer fluiden Partialmischung und einer polydispersen, reagierenden Partialsubstanz bestehen, werden nun zur Untersuchung von Regenfällen herangezogen. Die herabfallenden verschieden großen Regentropfen tauschen Masse, Impuls und Wärme mit ihrer wasserdampfhaltigen Umgebung aus, wodurch sich Vertikalgeschwindigkeit, Temperatur und Feuchtigkeit der Feuchtluft zeitlich und räumlich ändern. Außerdem beeinflusst das Verdampfen, Koagulieren und Zerfallen der herabsinkenden Tropfen die Anzahlverteilung der Regentropfengrößen.

Einen Einblick in den Ablauf dieser Vorgänge gewährt schon ein eindimensionales Modell einer Niederschlagszelle. Sie besteht

1. aus einer inneren Säule mit einem horizontalen Querschnitt  $F_R$ , in die aus der Wolke ununterbrochen Regen fällt, und ist
2. durch horizontalen Austausch mit einer endlichen Umgebung der horizontalen Ausdehnung  $F_U$  verbunden.

Sowohl im Regen- als auch im Umgebungsbereich formuliert man Bilanzgleichungen für die mit der Feuchtluftdichte gewogenen mittleren Flächengrößen. Neben dem vertikalen turbulenten Austausch von Wasserdampf, Vertikalimpuls und Enthalpie soll ein horizontaler Austausch dieser Flächengrößen die Strömungsverhältnisse einer Niederschlagszelle nachahmen. Die Reduktion der vollständigen dreidimensionalen Bilanzgleichungen auf die eindimensionale vertikale Form geschieht unter den Annahmen:

1. Die Dichte der trockenen Luft  $\rho_0$  ändere sich weder zeitlich noch horizontal, so daß die horizontale Divergenz trockener Luft gleich

wird.

$$\nabla_h \cdot \mathbf{v}_{h,0} = -\frac{\partial}{\partial z} w_0 - w_0 \frac{\partial}{\partial z} \ln \rho_0$$

2. Die Atmosphäre befinde sich im hydrostatischen Gleichgewicht; also ist der Auftrieb der feuchten Luft im Regenbereich gleich

$$\frac{\partial p_M}{\partial z} + \rho_M g = (-\tilde{\rho}_M + \rho_M) g = -\rho_M g \left( \frac{\tilde{\rho}_M}{\rho_M} - 1 \right) = \rho_M g \left( 1 - \frac{T_{vo}}{\tilde{T}_{vo}} \right)$$

und es bedeutet  $\tilde{\rho}_M$  die Feuchtluftdichte, gemittelt über die gesamte Fläche der Niederschlagszelle und  $T_{vo} = T_o \left( 1 + 0.61 \frac{\rho_1}{\rho_o} \right)$  die virtuelle Temperatur im Regenbereich.

3. Die Enthalpie der Feuchtluft ist durch  $h_M = c_{p,M} T_M + \text{const}$  gegeben; weiter soll es keine zeitlichen Änderungen der über Regen- und Umgebungsbereich horizontal gemittelten Drucke geben, so daß

$$\frac{d_o p_o}{dt} + \frac{d_1 p_1}{dt} \approx w_M \frac{\partial}{\partial z} p_M = -w_M \rho_M g$$

wird. Die Divergenz der äußeren Wärmeflüsse soll ebenso wenig vorhanden sein wie eine Strahlungserwärmung.

Indiziert man die physikalischen Größen im Umgebungsbereich der Niederschlagszelle mit  $U$  und verzichtet auf eine Kennzeichnung der horizontalen und gewogenen Mittelung der Größen in beiden Zellbereichen, dann lauten die simultan zu lösenden Gleichungssysteme:

1. Bilanzgleichungen der Feuchtluft im Regenbereich

$$(73) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_1 + w_M \frac{\partial}{\partial z} \rho_1 - \rho_1 w_M \frac{\partial}{\partial z} \ln \rho_o &= \dot{\rho}_1^* + K \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho_1 + E(\rho_1) \\ \frac{\partial}{\partial t} w_M + w_M \frac{\partial}{\partial z} w_M &= g \left( \frac{T_{vo}}{\tilde{T}_{vo}} - 1 \right) + \frac{1}{\rho_M} (\dot{\rho}_1^* (w_1 - w_M) + p_M) + \\ &\quad + K \frac{\partial^2}{\partial z^2} w_M + E(w_M) \\ \frac{\partial}{\partial t} T_M + w_M \left( \frac{\partial}{\partial z} T_M + \frac{g}{c_{p,M}} \right) &= \frac{1}{\rho_M c_{p,M}} (-L \dot{\rho}_1^* + \epsilon_M) + \\ &\quad + K \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_M + E(T_M) \end{aligned}$$

## 2. Bilanzgleichungen der Feuchtluft im Umgebungsbereich

$$(74) \quad \begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \rho_{1U} + w_{MU} \frac{\partial}{\partial z} \rho_{1U} - \rho_{1U} w_{MU} \frac{\partial}{\partial z} \ln \rho_o = K \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho_{1U} - \frac{\sigma}{1-\sigma} E(\rho_1) \\ & w_{MU} = - \frac{\sigma}{1-\sigma} w_M \\ & \frac{\partial}{\partial t} T_{MU} + w_{MU} \left( \frac{\partial}{\partial z} T_{MU} + \frac{g}{c_{p,M}} \right) = K \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_{MU} - \frac{\sigma}{1-\sigma} E(T_M) \end{aligned}$$

$E(\Psi) = -\alpha |w_M - w_{MU}| (\Psi - \Psi_U)$  ist die Vermischungsrate der physikalischen Größe  $\Psi$ ; der Vermischungskoeffizient wird im vorliegenden Modell zu  $\alpha = 4 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$  angesetzt. Für den Vertikalaustausch aller physikalischen Eigenschaften wird der konstante Austauschkoefizient  $K = 200 \text{ m}^2/\text{sec}$  genommen. Die diagnostische Gleichung für die Vertikalgeschwindigkeit der Feuchtluft im Umgebungsbereich sichert, daß die mittlere Vertikalbewegung in der gesamten konvektiven Niederschlagszelle zeitlich konstant bleibt.

Als Anfangszustand gibt man die vertikale Verteilung von relativer Feuchtigkeit, Temperatur und Vertikalwind der Feuchtluft im Regen- und Umgebungsbereich der Niederschlagszelle vor. Die herabfallenden Regentropfen erzeugen die notwendige Anfangsstörung. Am oberen Rand der Niederschlagszelle, der in der Regensäule der Wolkenbasis entspricht, soll Wasserdampfsättigung, konstante Temperatur und keine Vertikalgeschwindigkeit sein. Am Erdboden verschwinde der Vertikalwind, die Temperatur ändere sich auch während des Regens nicht und die relative Feuchtigkeit bleibe nur so lange konstant als der auf den Boden treffende Regenfluß kleiner als die Infiltrationsrate des Erdbodens ist, die zu  $1.25 \text{ cm/h}$  angenommen wird; andernfalls springe die Feuchtigkeit auf ihren Sättigungswert.

Zur numerischen Integration sei bemerkt, daß die Gleichungssysteme mit dem zeitlich vorwärts - räumlich zentrierten Differenzenverfahren unter Beachtung des linearen Berechnungsstabilitätskriteriums berechnet werden. Die Niederschlagszelle hat ein Bedeckungsverhältnis von  $\sigma = F_R / (F_U + F_R) = 0.04$ , eine vertikale Erstreckung von  $1000 \text{ m}$  und es erweisen sich zur numerischen Lösung Höhenschritte von  $\Delta z = 100 \text{ m}$  und Zeitschritte von  $\Delta t = 5 \text{ sec}$  als geeignet.

### 3.4 Ablaufschema der Mikroprozesse im Regenmodell

Zur Bestimmung der zeitlichen Änderung der diskreten Anzahldichteverteilung der Regentropfen, die sich vom Tropfenradius  $r_1 = 0.02 \text{ cm}$  in  $\Delta r = 0.02 \text{ cm}$  Abstand bis zum Radius  $r_K = 0.36 \text{ cm}$  erstreckt, eignet sich eine LAGRANGEsche Berechnungsmethode, die insbesondere KOVETZ & OLUND [17] verwendet haben. Danach wird die Regentropfengrößenverteilung

lung in einer bestimmten Höhe und zu einer bestimmten Zeit während eines Zeitschrittes  $\Delta t$  durch die Folge der Mikroprozesse

1. Sinken der Tropfen
2. Koagulieren der Tropfen
3. Zerfallen der Tropfen
4. Verdampfen der Tropfen

verändert. Am oberen Rand der Regensäule wird die Tropfengrößenverteilung in Form einer beliebigen, hier exponentiellen Verteilung vorgegeben.

Die zeitliche Änderung in der Anzahl der Regentropfen mit dem Radius  $r_k$  ( $k = 1 \dots K$ ) in einer Höhe  $z_n$  ( $n = 1 \dots N$ ) während eines Zeitschrittes  $\Delta t$  innerhalb eines Volumenelementes ist

1. infolge des Herabsinkens der Tropfen

$$f(r_k, z_n, t + \Delta t) = f(r_k, z_n + (V_{r_k} - w_M(z_n, t)) \Delta t, t).$$

Die Anzahldichte der Tropfen mit dem Radius  $r_k$  in der Höhe  $z_n$  zur Zeit  $t + \Delta t$  ist gleich der Anzahldichte von Tropfen mit dem gleichen Radius, die sich zur Zeit  $t$  in der Höhe  $z_n + (V_{r_k} - w_M(z_n, t)) \Delta t$  befunden haben;

2. aufgrund von Tropfenkoagulationen

$$\begin{aligned} f(r_k, z_n, t + \Delta t) = & f(r_k, z_n, t) + \\ & + \Delta t \left[ \sum_{\ell=1}^{k-1} \sum_{m=\ell+1}^k B(k/\ell, m) K(r_\ell, r_m) f(r_\ell, z_n, t) f(r_m, z_n, t) - \right. \\ & \left. - f(r_k, z_n, t) \sum_{\ell=1}^K K(r_k, r_\ell) f(r_\ell, z_n, t) \right]. \end{aligned}$$

Dabei bewirkt der Faktor  $B(k/\ell, m)$  eine ausgewogene Aufteilung von Tropfenmassen auf die Radien  $r_k$  ( $k = 1 \dots K$ ), zwischen die einzelne Tropfen durch Koagulation geraten.  $B(k/\ell, m)$  stellt sicher, daß sowohl die Tropfenzahl als auch die Gesamtmasse aller Tropfen erhalten bleibt:

$$B(k/\ell, m) = \begin{cases} (r_\ell^3 + r_m^3 - r_{k-1}^3) / (r_k^3 - r_{k-1}^3) & \text{für } r_{k-1}^3 < r_\ell^3 + r_m^3 \leq r_k^3 \\ (r_{k+1}^3 - r_\ell^3 - r_m^3) / (r_{k+1}^3 - r_k^3) & \text{für } r_k^3 < r_\ell^3 + r_m^3 < r_{k+1}^3 \\ 0 & \text{für } r_\ell^3 + r_m^3 \leq r_{k-1}^3 \\ & \text{oder } r_{k+1}^3 \leq r_\ell^3 + r_m^3 \end{cases}$$

### 3. durch Zerfall von Tropfen

$$f(r_k, z_n, t + \Delta t) = f(r_k, z_n, t) + \Delta t \left[ \sum_{\ell=k}^K f(r_\ell, z_n, t) Q(r_k, r_\ell) P(r_\ell) - f(r_k, z_n, t) P(r_k) \right]$$

Um die Wassermasse bei der Tropfenkoagulation innerhalb einer endlichen vorgegebenen Tropfenverteilung zu erhalten, werden Tropfen, die durch Koagulation jenseits des Radius  $r_K$  gelangen durch Zerfall wieder in den festgelegten Größenbereich zurückgeworfen, da die Zerfallswahrscheinlichkeit bei den großen Regentropfen gegen 1 strebt;

4. hervorgerufen durch Verdampfen von Tropfen

$$f(r_k, z_n, t + \Delta t) = \sum_{\ell=1}^K G(k, \ell) f(r_\ell, z_n, t)$$

Der Faktor  $G(k, \ell)$  gibt die massenmäßig ausgewogene Aufteilung von Tropfen  $r_\ell$  an, die während ihres Verdampfens in die Nähe des Tropfens  $r_k$  gelangen:

$$G(k, \ell) = \begin{cases} ((r_\ell + \dot{r}_\ell)^3 - r_{k-1}^3) / (r_k^3 - r_{k-1}^3) & \text{für } r_{k-1}^3 < (r_\ell + \dot{r}_\ell)^3 \leq r_k^3 \\ (r_{k+1}^3 - (r_\ell + \dot{r}_\ell)^3) / (r_{k+1}^3 - r_k^3) & \text{für } r_k^3 < (r_\ell + \dot{r}_\ell)^3 < r_{k+1}^3 \\ 0 & \text{für } (r_\ell + \dot{r}_\ell)^3 \leq r_{k-1}^3 \\ & \text{oder } r_{k+1}^3 \leq (r_\ell + \dot{r}_\ell)^3 \end{cases}$$

Die Verdampfungsrate des Regentropfens vom Radius  $r_\ell$  ist

$$\dot{r}_\ell = \left( \frac{D}{\rho_w} \frac{Sh}{2} \right) \frac{1}{r_\ell} \left( U \frac{p_{1s}(T_M(\infty))}{T_M(\infty)} - \frac{p_{1s} T_M(r)}{T_M(r)} \right),$$

wobei  $T_M(r)$  die Gleichgewichtstemperatur oder Feuchttemperatur des fallenden Tropfens darstellt und  $\rho_w$  die Dichte von Wasser ist.

### 3.5 Ergebnisse der numerischen Integration

#### 3.5.1 Einfluß der Mikroprozesse auf die Regenstruktur

Die Anzahldichteverteilung der Regentropfen kann für jede Höhe und zu jedem Zeitpunkt berechnet werden. Bereits die für den Erdboden berechneten Regentropfenspektren geben einen Aufschluß über den Einfluß verschiedener Mikroprozesse auf einen Regen, der durch eine 1000 m mächtige feucht-thermisch strukturierte Atmosphärenschicht fällt. Dazu läßt man im Niederschlagsmodell eine Regenmenge der Massendichte

$\rho_2 = 1.55 \cdot 10^{-6} \text{ [g/cm}^3 \text{]},$  deren Tropfengrößen in einer MARSHALL-

PALMERschen Verteilung (Spektrum B) angeordnet sind, durch eine feuchte Luftschicht fallen, die eine Bodentemperatur von  $293.16 [^{\circ}\text{K}]$  mit einem vertikalen Temperaturgradienten von  $0.8 \cdot 10^{-4} [^{\circ}\text{K}/\text{cm}]$  und eine relative Feuchtigkeit von 0.6 aufweist. Am Erdboden beobachtet man dann die zeitliche Veränderung in der Anzahldichteverteilung der Regentropfengrößen, die durch das Zusammenspiel von Sedimentation, Koagulation, Zerfallen und Verdampfen erzielt worden ist.

In Abbildung 9 erkennt man, daß das Tropfenspektrum am Erdboden erst dann in die an der Wolkenbasis vorgegebene MARSHALL-PALMERsche Verteilung (Spektrum B) übergeht, wenn auch die kleineren Tropfen mit ihrer geringen Fallgeschwindigkeit am Boden angelangt sind. Abbildung 10 berücksichtigt die Koagulation während des Tropfenfalls und man findet am Erdboden nach hinreichender Zeit ein charakteristisches Tropfenspektrum, in dem kleinere Tropfen von größeren eingefangen worden sind. Wird nur der Zerfall herabfallender Tropfen betrachtet, dann wächst die Zahl der kleineren Tropfen auf Kosten der größeren und es entstehen die durch Sedimentieren und Zerfallen gebildeten Spektren der Abbildung 11. Das Verdampfen herabfallender Tropfen in Abbildung 12 erzeugt ein dem Sedimentieren ähnliches Tropfenspektrum, bei dem nur die Anzahl der Tropfen, insbesondere der verdampfungsaktiven kleineren, vermindert ist. Abbildung 13 stellt den Einfluß aller mikrophysikalischer Vorgänge in der herabfallenden MARSHALL-PALMERschen Verteilung dar und zeigt am Erdboden eine Verminderung der kleineren und eine Zunahme der mittleren bis großen Tropfen.

### 3.5 2 Einfluß der Regenstruktur auf die Hydrothermodynamik der Atmosphäre im Niederschlagsbereich

Um den Einfluß der Regenstruktur auf Vertikalgeschwindigkeit, Temperatur und Feuchtigkeit der vom Regen durchströmten Atmosphärenschicht zu untersuchen, läßt man zwei verschiedene Regentropfengrößenverteilungen gleicher Regendichte  $\rho_2 = 1.65 \cdot 10^{-6} [\text{g}/\text{cm}^3]$  aus der Wolke fallen. Die beiden Regenfälle unterscheiden sich darin, daß in der Anzahldichteverteilung A die kleineren Tropfen den größten Anteil an der Regenmasse haben, während es in der Anzahldichteverteilung C die größeren Tropfen sind. Als Mikroprozesse werden diesmal nur Sinken und Verdampfen der Regentropfen zugelassen (Abbildung 14).

Man erkennt in den Abbildungen 15, 16, 17, 18, daß beim kleintropfigen Spektrum A Abwind, Abkühlung und relative Feuchtigkeit, beim großtropfigen Spektrum C dagegen Regendichte und Regenfluß stärker ausgeprägt sind.

Grundsätzlich löst der Tropfenfall durch den Reibungswiderstand einen nach unten gerichteten Feuchtluftstrom aus. Während die Regentropfen verdampfen, kühlt sich die Atmosphärenschicht ab und es entsteht ein negativer Auftrieb, dem die kompressive Erwärmung der Luft beim Absinken, die Feuchteanreicherung bei Phasenumwandlungen, der vertikale Wasserdampf- und Wärmeaustausch und der horizontale Feuchtluftaustausch mit der Umgebung entgegenwirken.

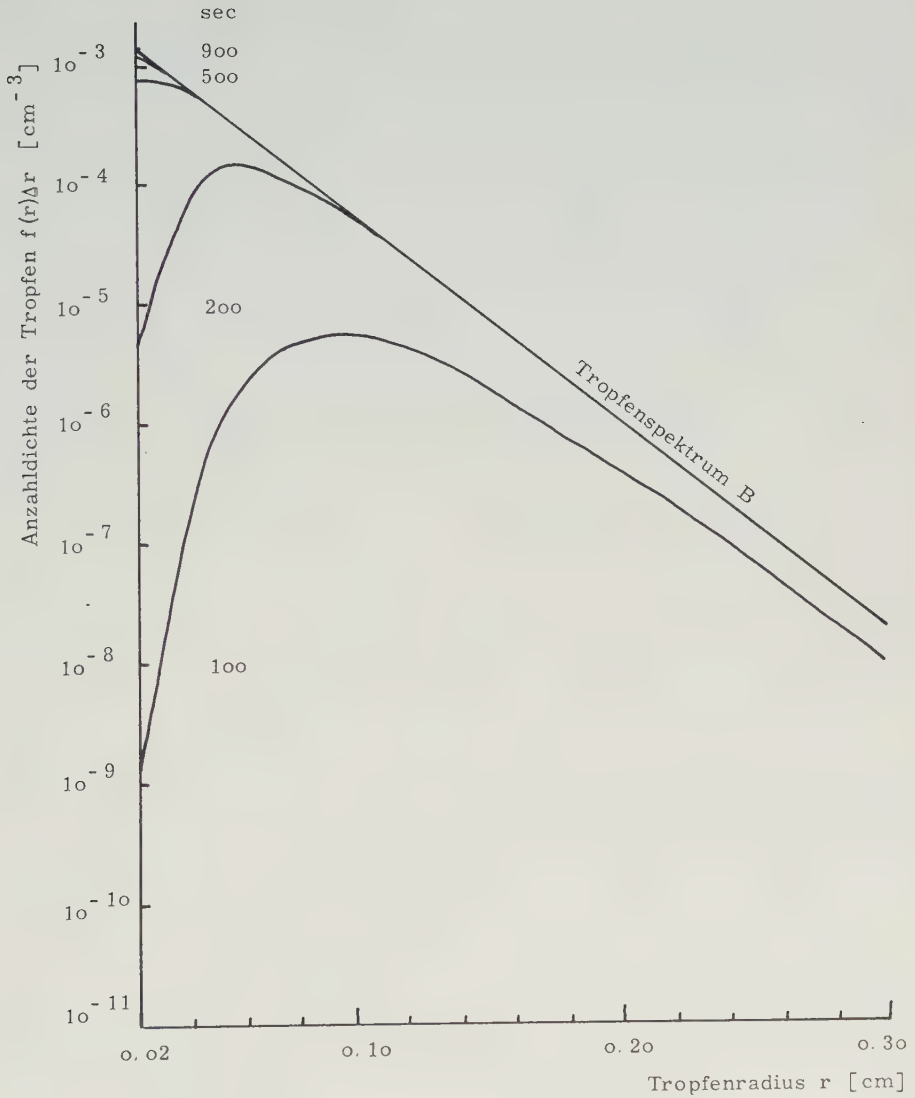


Abb. 9: Zeitliche Änderung in der Anzahlldichtevertelung B herabfallender Regentropfen während eines Regenfalls am Boden.

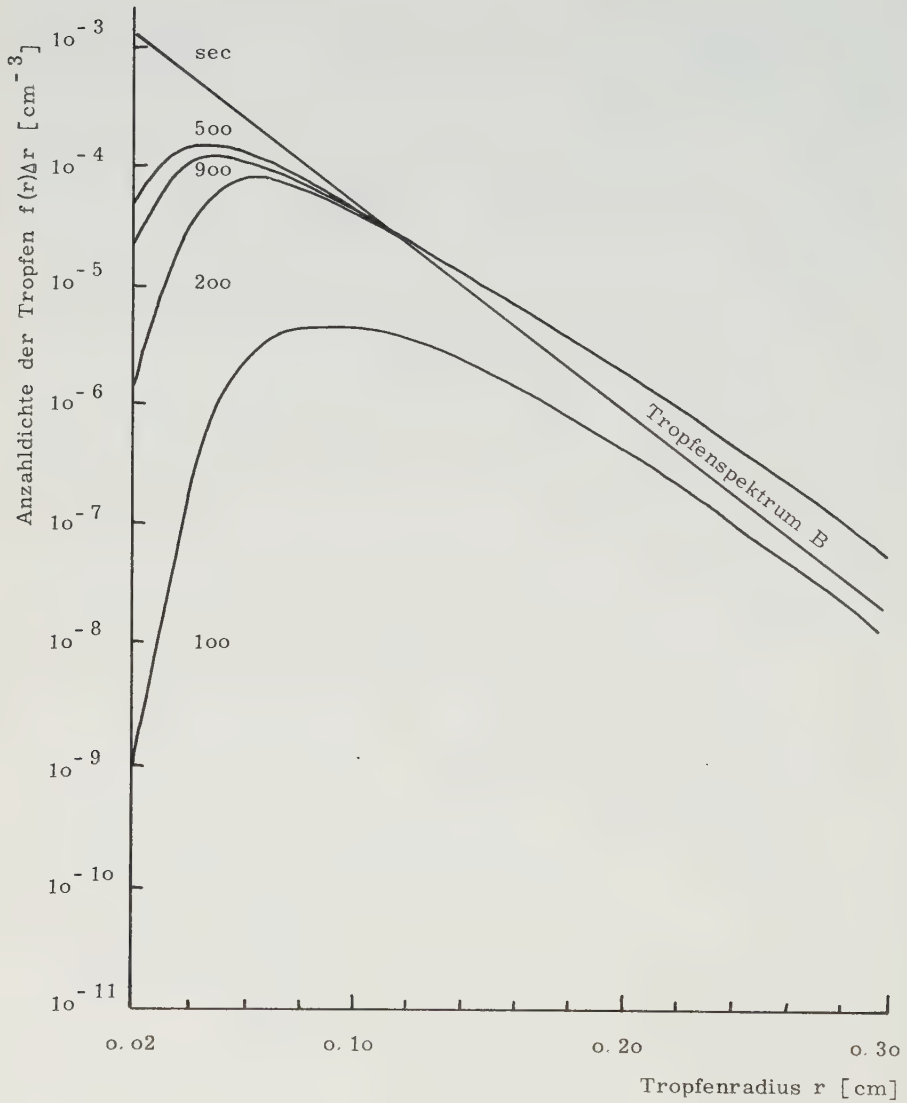


Abb. 10: Zeitliche Änderung in der Anzahldichteverteilung B herabfallender und miteinander koagulierender Regentropfen während eines Regenfalls am Boden.

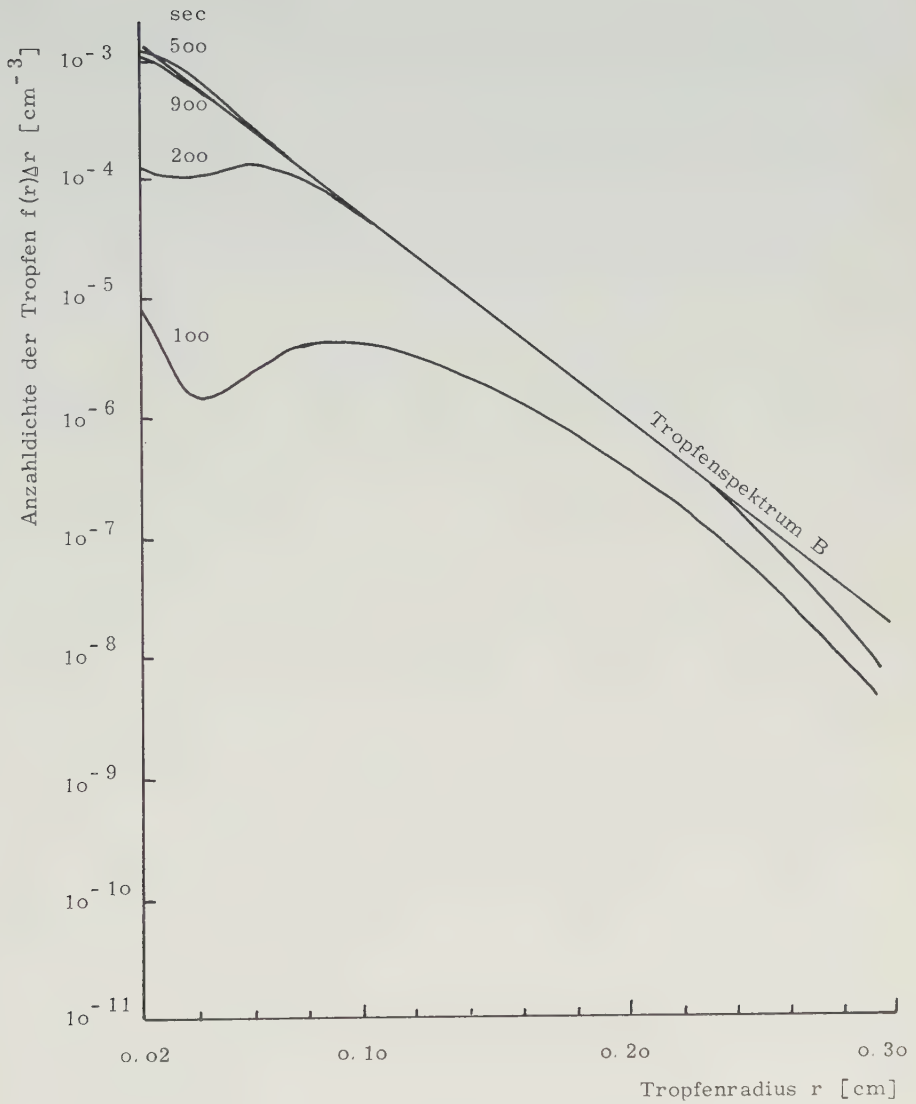


Abb. 11: Zeitliche Änderung in der Anzahldichtevertelung B herabfallender und zerfallender Regentropfen während eines Regenfalls am Boden.

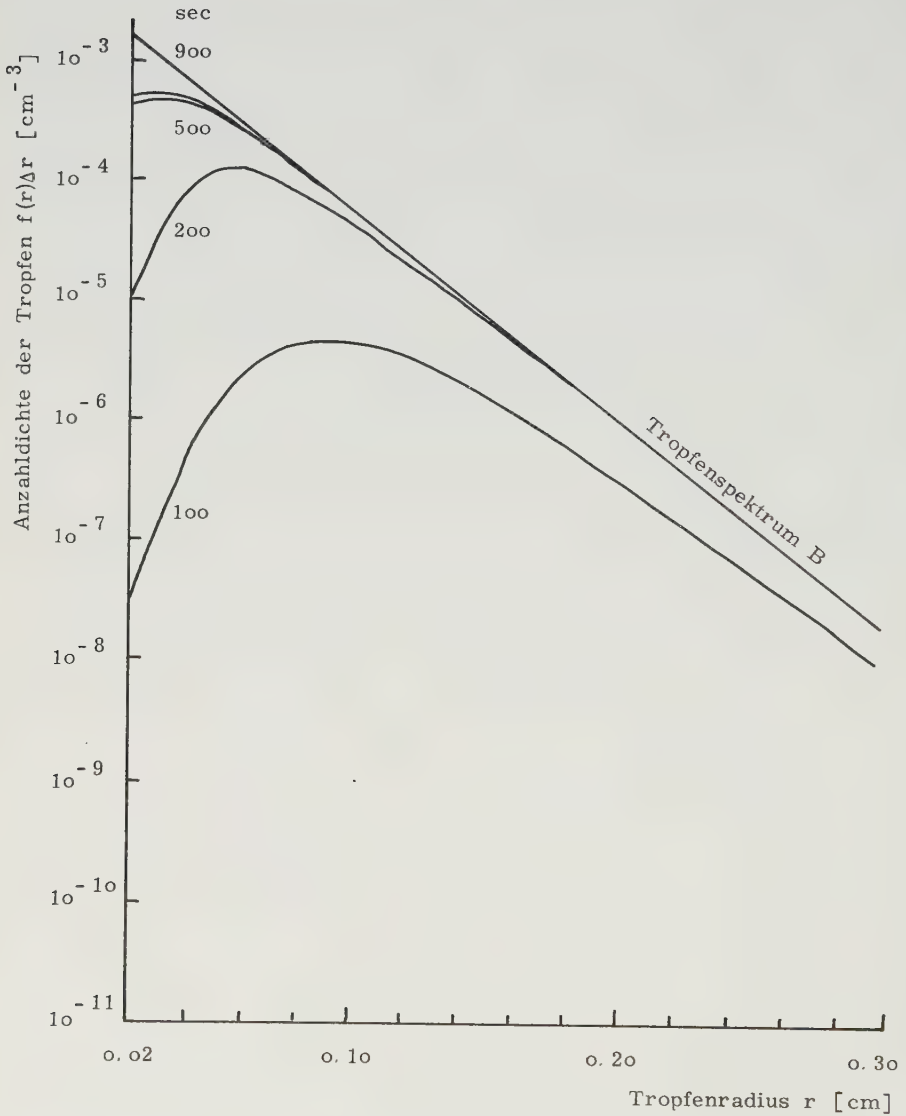


Abb. 12: Zeitliche Änderung in der Anzahldichteverteilung  $B$  herabfallender und verdampfender Regentropfen während eines Regenfalls am Boden.

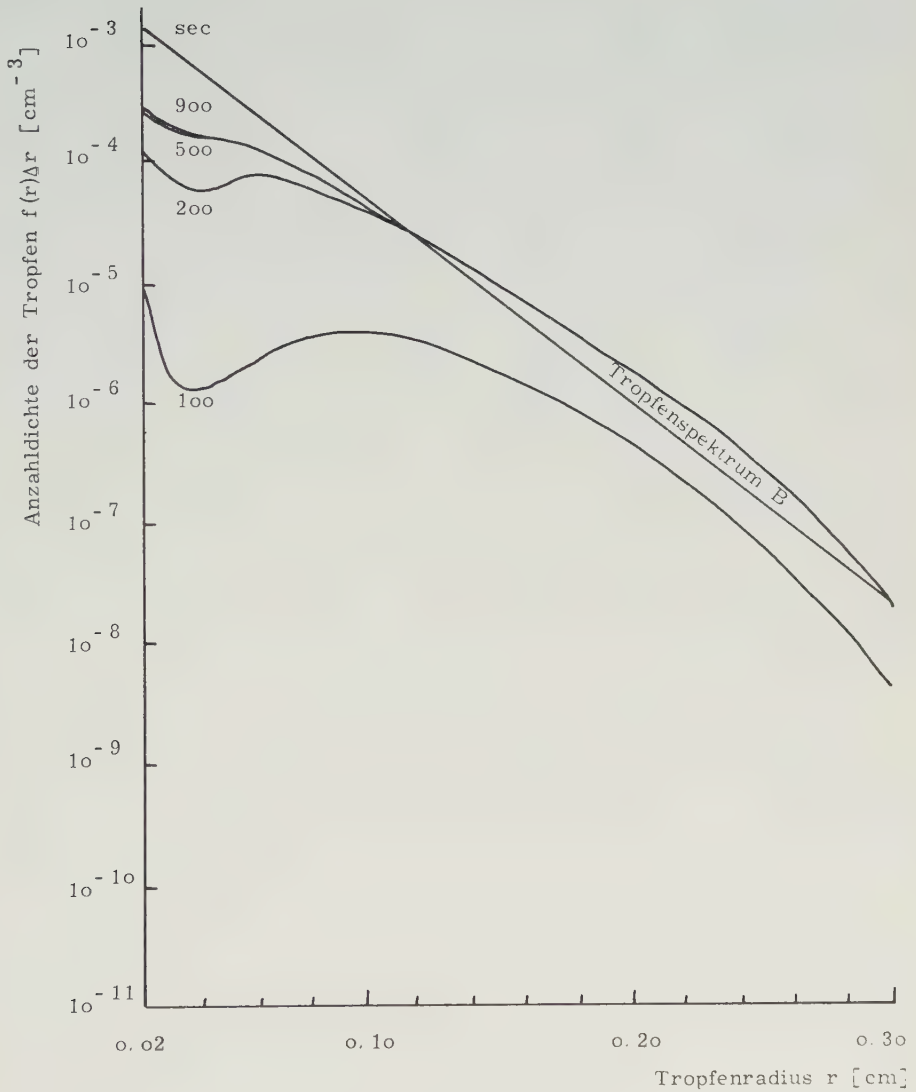


Abb. 13: Zeitliche Änderung in der Anzahldichteverteilung B herabfallender, koagulierender, zerfallender und verdampfender Regentropfen während eines Regenfalls am Boden

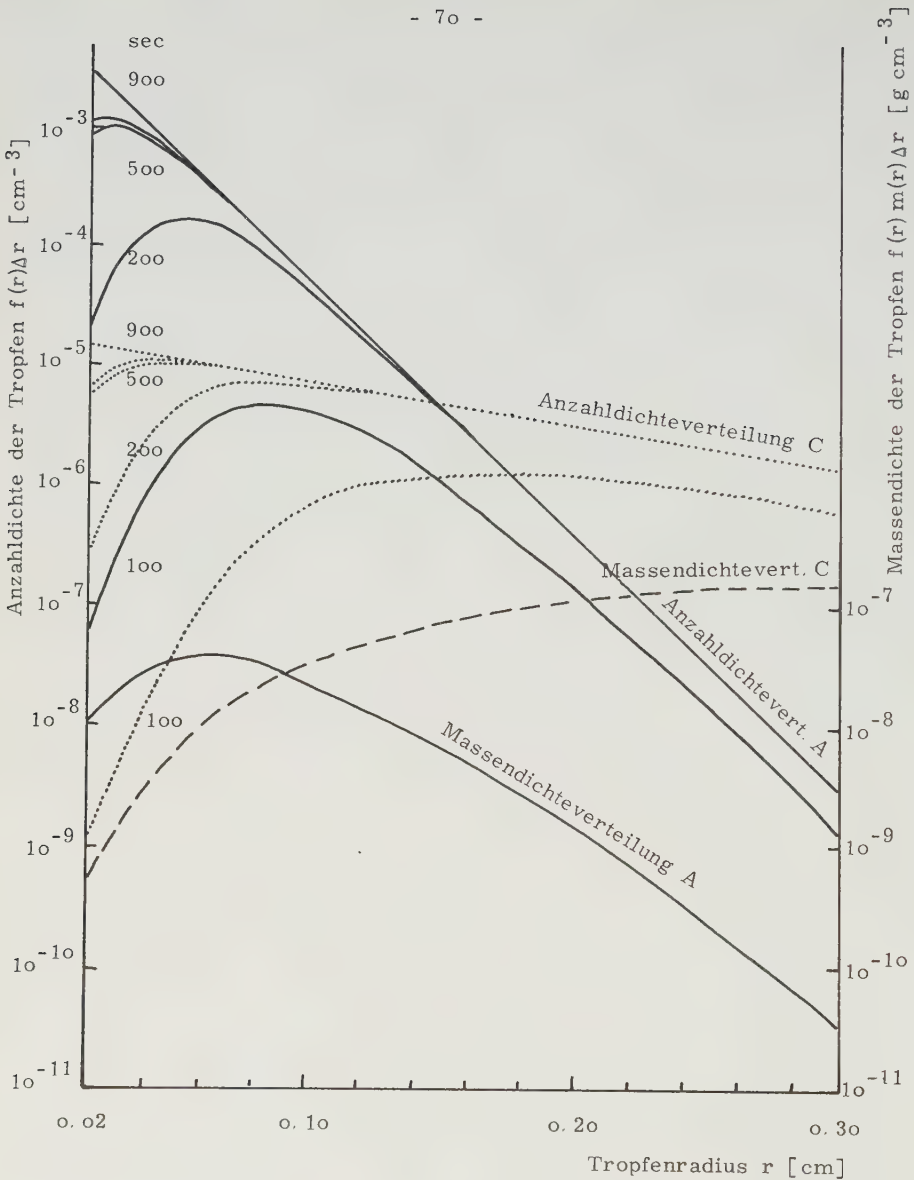


Abb. 14: Zeitliche Änderung in den Anzahldichtevertelungen A und C der Regentropfen bei Regenfällen am Boden. Die Massendichtevertelungen der beiden Tropfenspektren sind ebenfalls dargestellt.

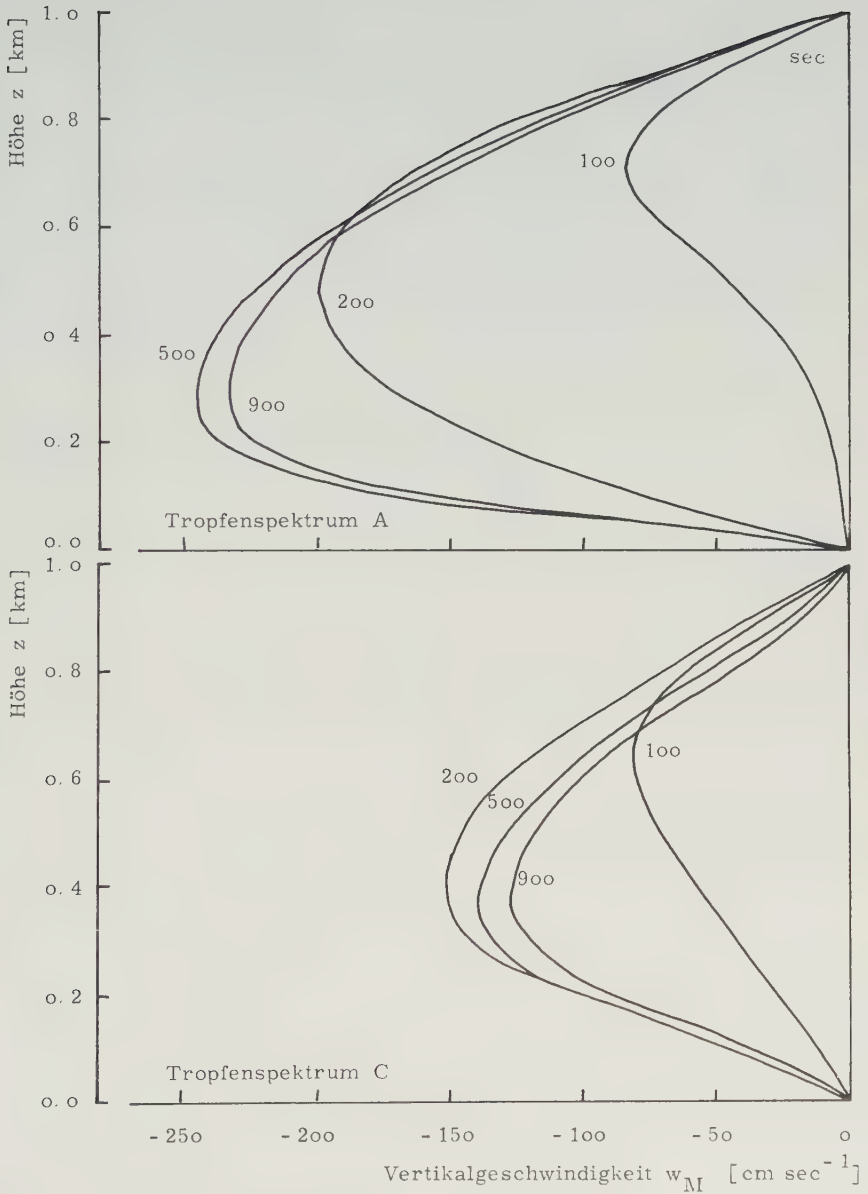


Abb. 15: Zeitliche Änderung der Vertikalgeschwindigkeit der Feuchtluft bei Regenfällen mit den unterschiedlichen Tropfenverteilungen A und C.

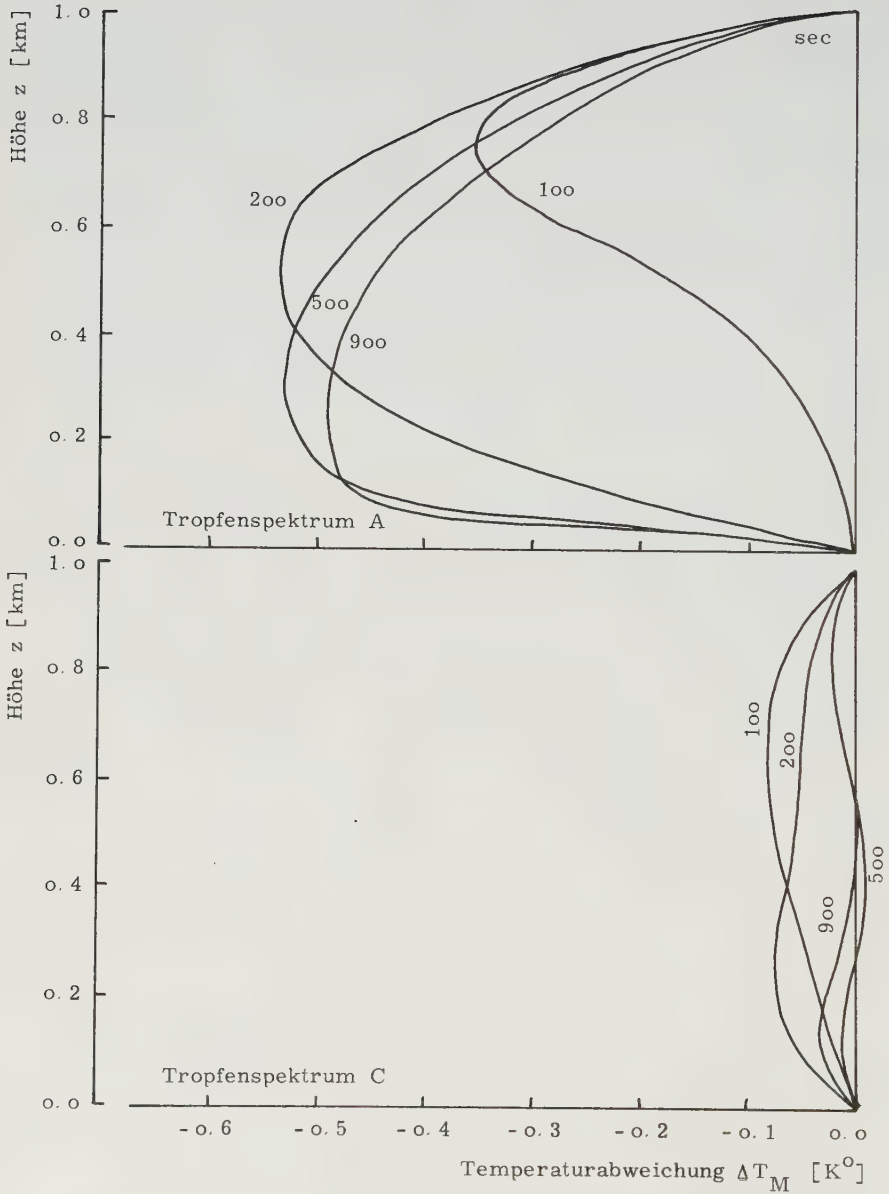


Abb. 16: Zeitliche Änderung der Temperaturabweichung  $\Delta T_M = T_M - \tilde{T}_M$  in der Feuchtluft bei Regenfällen mit den unterschiedlichen Tropfenverteilungen A und C.

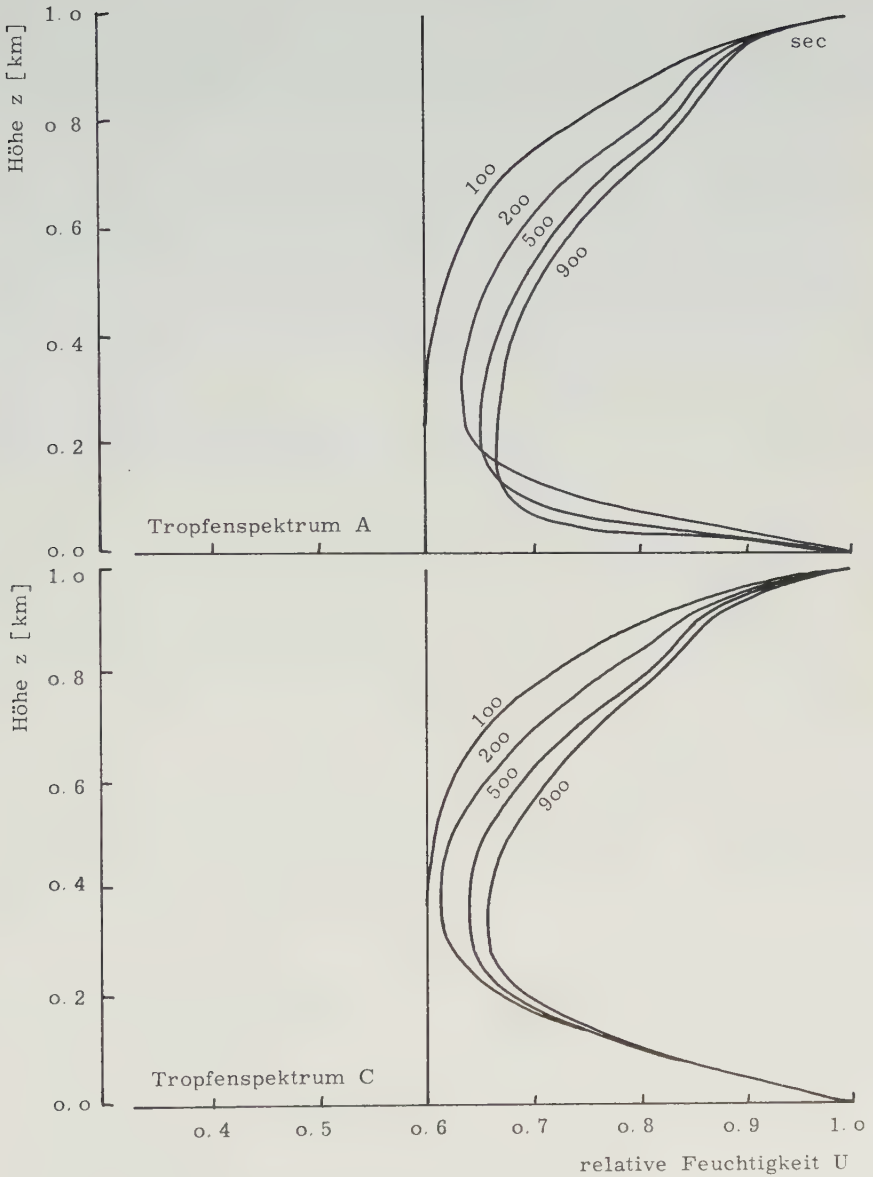


Abb. 17: Zeitliche Änderung der relativen Feuchtigkeit in der Feuchtluft bei Regenfällen mit den unterschiedlichen Tropfenverteilungen A und C.

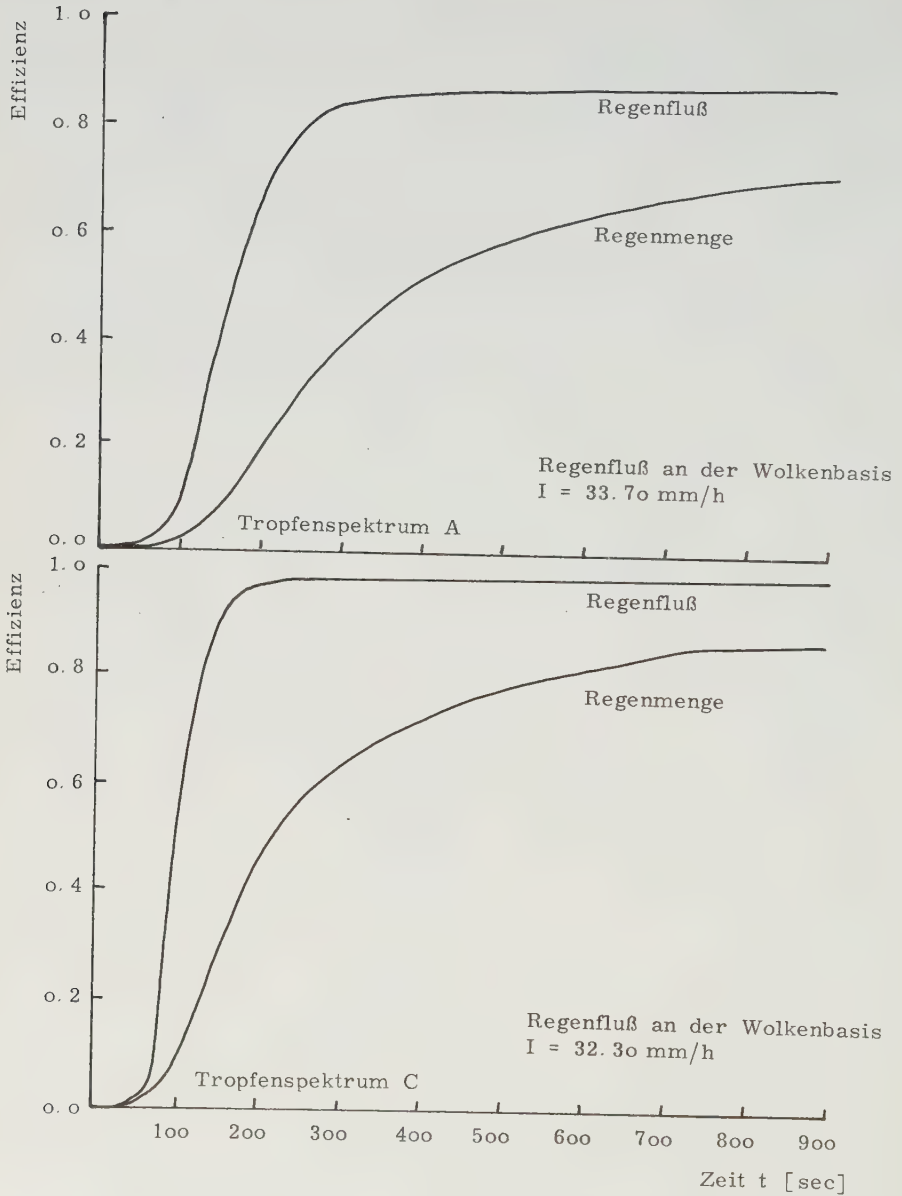


Abb. 18: Zeitliche Änderung von Regenfluß und Regenmenge am Boden bei Regenfällen mit den unterschiedlichen Tropfenverteilungen A und C.

Atmosphärenschichten mit geringer Feuchtigkeit und nahezu trockenadiabatischem vertikalem Temperaturgradienten fördern die Entwicklung relativ starker Abwinde und Abkühlungen.

### 3.6 Parametrisierung der Mikrostruktur im konvektiven Regenmodell

Die Erzeugungs- und Übergangsraten, die beim Regenfall zwischen der feuchten Luft und den Regentropfen wirksam sind, konnten bei Kenntnis der Mikroprozesse im Tropfensystem bestimmt werden. Interessiert man sich aber in erster Linie nicht für die zeitliche Entwicklung der Anzahl-dichteverteilung  $f(r, z, t)$  der Tropfen, sondern nur für die Änderung des Wassergehaltes  $\rho_2(z, t)$ , dann muß man Ansätze für Erzeugungs- und Übergangsraten suchen, die keinen direkten Rückgriff auf die Mikrostruktur des Regens enthalten.

Zur Parametrisierung der Massenerzeugungsrate  $\dot{\rho}_1^*$  von Wasserdampf kann man die bilinear aufgebaute Entropiedichteerzeugung in der GIBBS-schen Gleichung heranziehen. Sie hat beim Verdampfen von Wasser

$$\mathcal{B}_2 \rightarrow \mathcal{B}_1$$

die Form

$$\sum_{k=1}^2 \mu_k \dot{\rho}_k^* = J_{2,1} A_{2,1}^*,$$

mit der Reaktionsgeschwindigkeit  $J_{2,1} = \dot{\rho}_1^*$  und der Massenaffinität

$$A_{2,1} = \mu_2 - \mu_1 = -R_1 T_M \ln \frac{p_1}{p_{1s}}.$$

Wenn man bedenkt, daß die Wachstumsgeschwindigkeit der Regenwassermenge sowohl von der Massenaffinität oder dem Sättigungsdefizit von Wasserdampf als auch von der Regenstruktur oder dem Dispersionsgrad des Regenwassers abhängt, kann man einen ONSAGERschen Ansatz für die Verdampfung des Regens in der Form

$$J_{2,1} = G(\rho_2) \frac{\rho_2}{\rho_{2,m}} A_{2,1} \text{ [g cm}^{-3} \text{ sec}^{-1}]$$

versuchen.  $G(\rho_2) \text{ [g cm}^{-3} \text{ sec/cm}^2]$  stellt einen dispersen Massenübergangskoeffizienten dar, der der Einfluß verschieden großer wasserdampfaustauschender Wasseroberflächen bei unterschiedlichen Regenstrukturen berücksichtigt. Der Korrekturfaktor  $\rho_2/\rho_{2,m}$  soll bewirken, daß die Verdampfung der Regenmasse bei niedrigem Wassergehalt auch geringer bleibt als bei höheren;  $\rho_{2,m}$  ist im Niederschlagsmodell die Regendichte an der Wolkenuntergrenze. Größenordnungsabschätzungen geben  $G(\rho_2) = 10^{-13} \dots 10^{-17} \text{ [g cm}^{-5} \text{ sec]}$ . Kleine  $G(\rho_2)$ -Werte vertreten

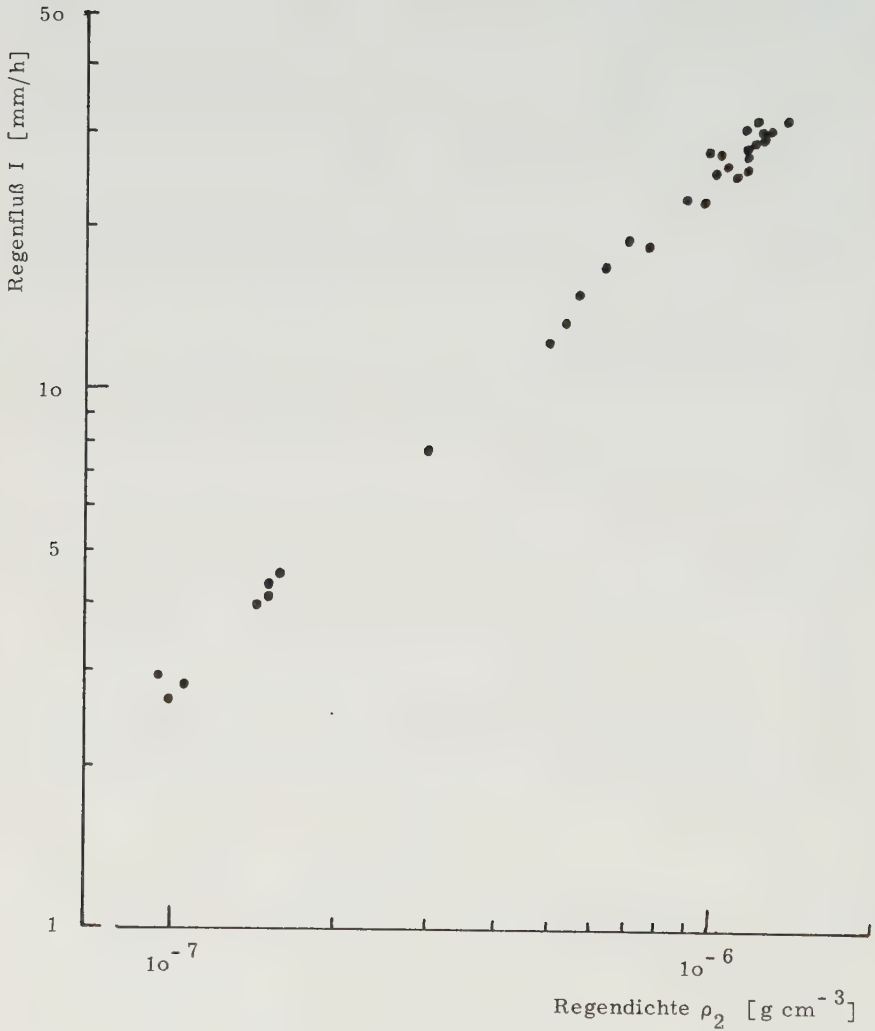


Abb. 19: Der Regenfluß I als Funktion der Regendichte  $\rho_2$  am Boden für verschiedene exponentielle Tropfenverteilungen.

schwach geneigte, großtropfige, große  $G(\rho_2)$ -Werte dagegen steil geneigte, kleintropfige Regenspektren.

In der Bilanzgleichung für die Regendichte benötigt man die Kenntnis einer effektiven Fallgeschwindigkeit der Regenmasse, die durch

$$|\dot{w}_2^*(z, t)| = \frac{\int f(r) m(r) (-V_r + w(z, t)) dr}{\int f(r) m(r) dr} = \frac{I(z, t)}{\rho_2(z, t)}$$

definiert ist und die man aus der Darstellung Abbildung 19 der Bodenregenintensität  $I$  in Abhängigkeit von der Regenmassendichte entnimmt, in der Ergebnisse des mikrostrukturierten Regenmodells eingetragen sind. Man macht für die effektive Sinkgeschwindigkeit den Ansatz

$$\dot{w}_2^* = -640 \frac{\rho_2}{\rho_{2,m}} + w_m \quad [\text{cm sec}^{-1}]$$

Der Impulsaustausch beim Herabsinken der Regenmasse durch die Feuchtluft ist wie im mikrostrukturierten Modell gleich

$$p_M = -p_2 = -\rho_2 g$$

Für den Wärmeaustausch könnte man einen Ansatz

$$e_M = -G(T) \frac{\rho_2}{\rho_{2,m}} (T_M - T_F)$$

nehmen, bei dem  $T_F = T_M - \frac{L}{c_{p,M} T_M} (\rho_{1s}(T_F) - \rho_1(T_M))$  die Feuchttemperatur der Regenmasse und  $G(T)$  einen dispersen Wärmeübergangskoeffizienten darstellt.

Das Gleichungssystem im Regenbereich des eindimensionalen konvektiven Niederschlagsmodells nimmt nun unter Voraussetzung eines Nichtgleichgewichtes zwischen Wasserdampf und Wasser ( $A_{2,1} \neq 0$ ) und eines thermischen Gleichgewichtes zwischen Wassermasse und Feuchtluft ( $e_M = 0$ ) folgende Form an:

(75)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho_1 + w_M \frac{\partial}{\partial z} \rho_1 - \rho_1 w_M \frac{\partial}{\partial z} \ln \rho_0 &= \dot{\rho}_1^* + K \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho_1 + E(\rho_1) \\
 \frac{\partial}{\partial t} \rho_2 + w_2 \frac{\partial}{\partial z} \rho_2 - \rho_2 w_M \frac{\partial}{\partial z} \ln \rho_0 &= -\dot{\rho}_1^* + K \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho_2 \\
 \frac{\partial}{\partial t} w_M + w_M \frac{\partial}{\partial z} w_M &= g \left( \frac{T_{vo}}{\tilde{T}_{vo}} - 1 \right) + \frac{1}{\rho_M} (\dot{\rho}_1^* (w_1^* - w_M)) + p_M + \\
 &\quad + K \frac{\partial^2}{\partial z^2} w_M + E(w_M) \\
 \frac{\partial}{\partial t} T_M + w_M \left( \frac{\partial}{\partial z} T_M + \frac{g}{c_{p,M}} \right) &= \frac{1}{\rho_M c_{p,M}} (-L \dot{\rho}_1^* + \epsilon_M) + \\
 &\quad + K \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_M + E(T_M)
 \end{aligned}$$

wobei die Parametrisierungsansätze

(76)

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_1^* &= G(\rho_2) \frac{\rho_2}{\rho_{2,m}} A_{2,1} \\
 \dot{\rho}_1^* (w_1^* - w_M) &= G(\rho_2) \frac{\rho_2}{\rho_{2,m}} A_{2,1} (w_2^* - w_M) \\
 w_2^* &= w_2 = -640 \frac{\rho_2}{\rho_{2,m}} + w_M \\
 p_M &= -\rho_2 g \\
 \epsilon_M &= 0
 \end{aligned}$$

Verwendung finden.

Für verschiedene disperse Massenübergangsfaktoren erhält man aus der numerischen Integration dieses Gleichungssystems charakteristische Unterschiede. Außerdem kann man eine Zuordnung der Ergebnisse von mikrostrukturiertem und parametrisiertem Modell versuchen, wie es in den Abbildungen 20, 21, 22, 23 geschehen ist. Die zeitlichen Änderungen von Vertikalgeschwindigkeit, Temperatur und Feuchtigkeit der Feuchtluft sind durchaus miteinander vergleichbar; nur der parametrisierte Regenfluß ist niedriger als der des polydispersen Tropfensystems. Da der Grund für dieses Verhalten in dem verwendeten Ansatz für die effektive Sinkgeschwindigkeit der Regenmasse liegen dürfte, wäre eine geeignetere Parametrisierung des Ausfallvorganges unter Verwendung eines dispersen Strukturkoeffizienten anzustreben.

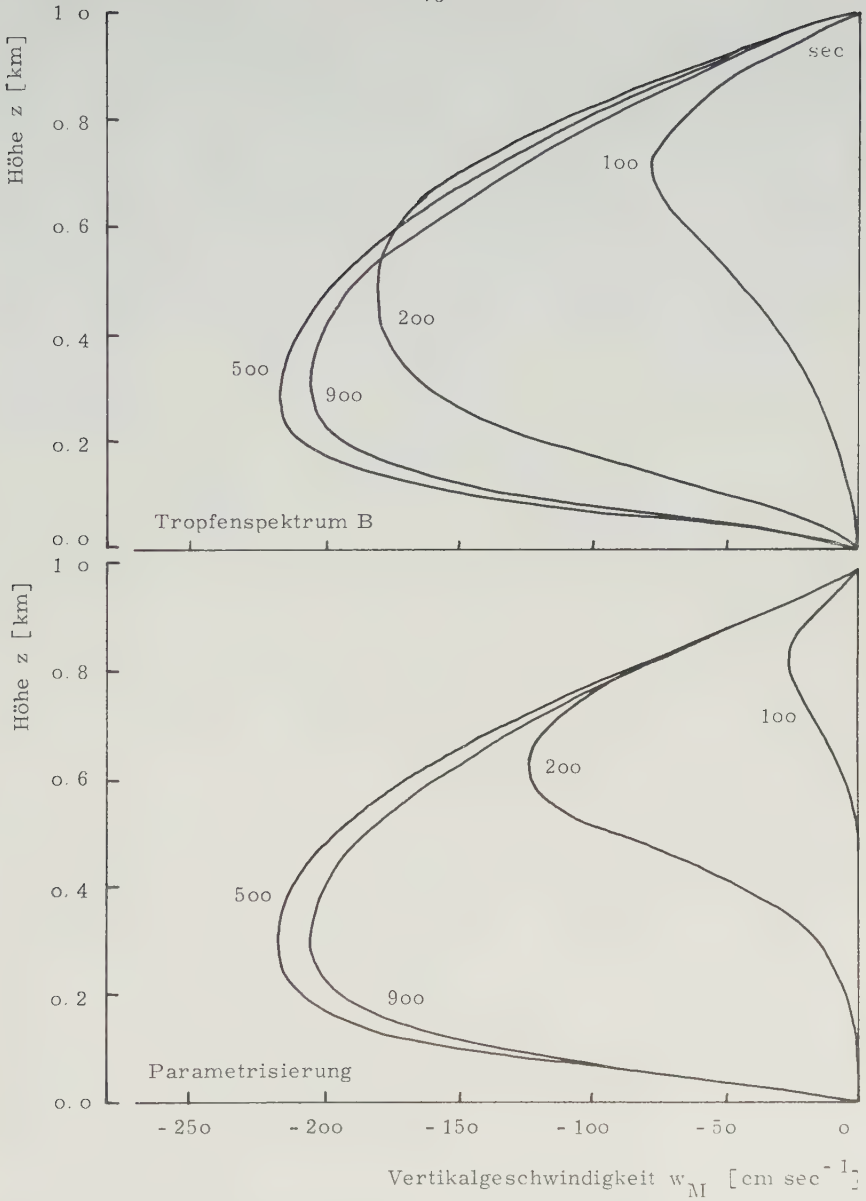


Abb. 20: Zeitliche Änderung der Vertikalgeschwindigkeit der Feuchtluft bei Regenfällen mit 1) der Tropfenverteilung B und 2) dem Parametrisierungsansatz ( $G(\rho_2) = 7.5 \cdot 10^{-18} \text{ g cm}^{-5} \text{ sec}$ )

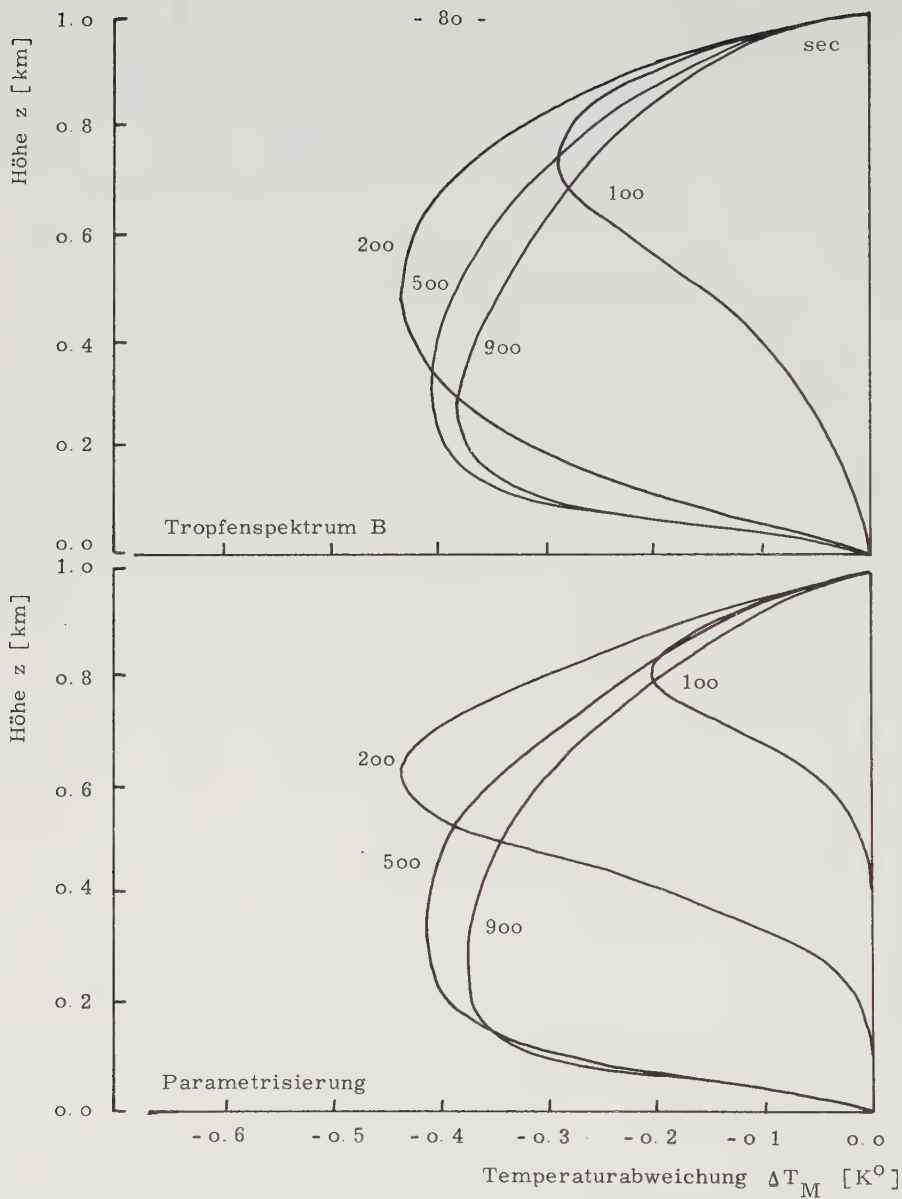


Abb. 21: Zeitliche Änderung der Temperaturabweichung  $\Delta T_M = T_M - \tilde{T}_M$  in der Feuchtluft bei Regenfällen mit 1) der Tropfenverteilung B und 2) dem Parametrisierungsansatz ( $G(\rho_2) = 7.5 \cdot 10^{-18} \text{ g cm}^{-5} \text{ sec}$ ).

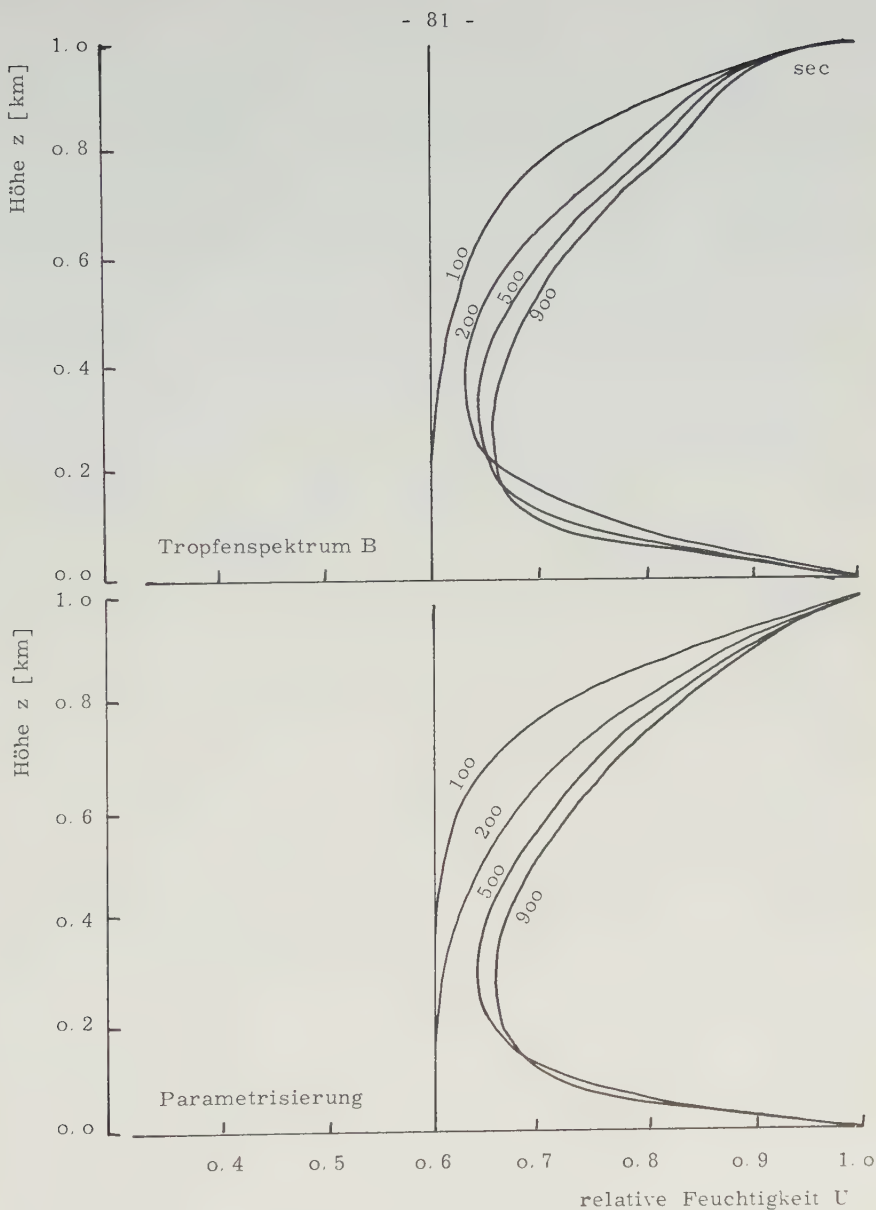


Abb. 22: Zeitliche Änderung der relativen Feuchtigkeit in der Feuchtluft bei Regenfällen mit 1) der Tropfenverteilung B und 2) dem Parametrisierungsansatz ( $G(\rho_2) \approx 7.5 \cdot 10^{-18} \text{ g cm}^{-5} \text{ sec}$ )

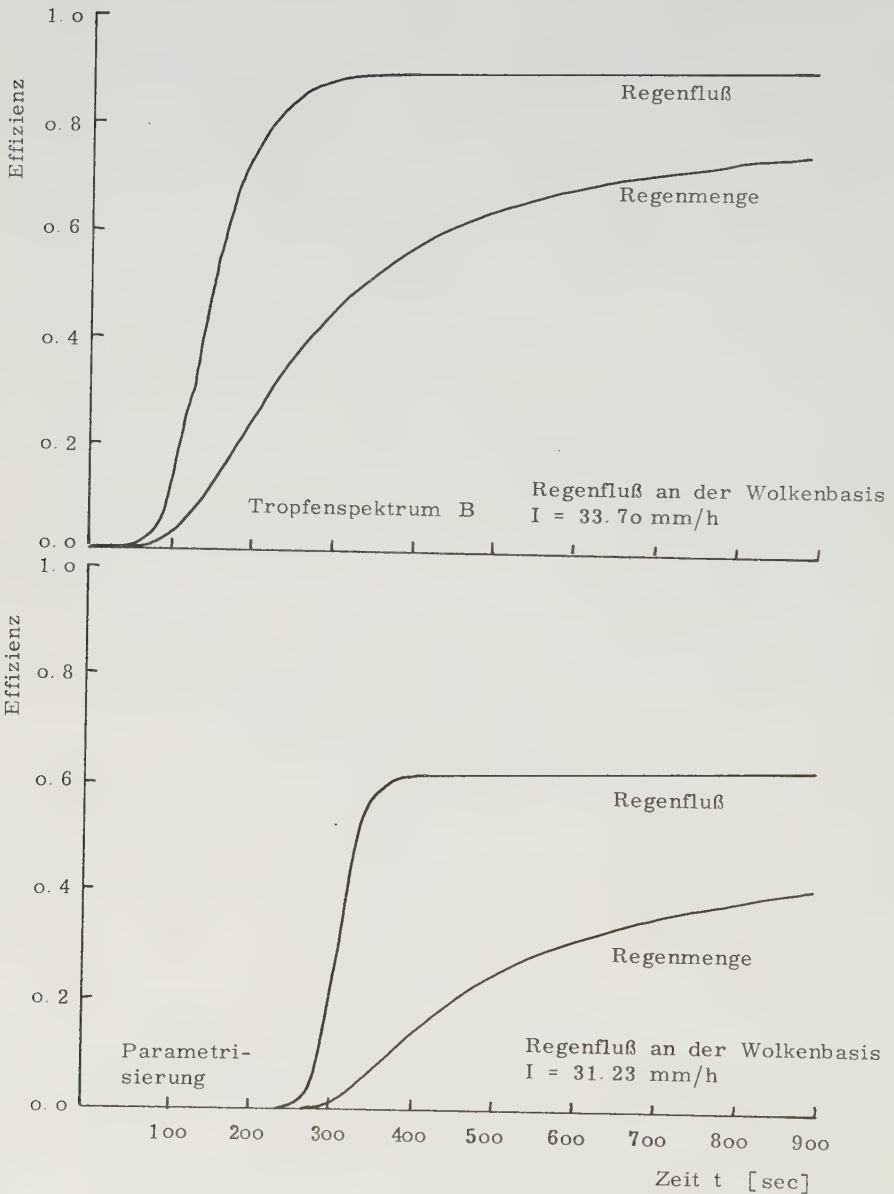


Abb. 23 : Zeitliche Änderung von Regenfluß und Regenmenge am Boden bei Regenfällen mit 1) der Tropfenverteilung B und 2) dem Parametrisierungsansatz ( $G(\rho_2) = 7.5 \cdot 10^{-18} \text{ g cm}^{-5} \text{ sec}$ ).

## SCHLUSSBEMERKUNG

Es ist das Ziel der vorliegenden Arbeit gewesen, eine systematische Theorie mikrostrukturierter fluider Mischungen zu entwickeln, die eine Verbindung zwischen der feldmäßigen Beschreibung der Wolken und der Partikelstruktur der Wassersubstanzen herstellt. Die Untersuchung der Mikrostruktur von Wasserwolken und die Ergebnisse über den Einfluß von Regenfällen auf die Atmosphäre sind Meilensteine auf dem Wege zu einer allgemeinen Theorie der Wolken. Viel bleibt noch zu tun, meßtechnisch wie theoretisch. Es muß die Turbulenz in den Wolken erforscht und die polydisperse, kristalline Eisphase zusammen mit dem Wassertropfensystem betrachtet werden. Der BERGERON-FINDEISENSche Prozeß der Niederschlagsbildung in Form von Regen, Schnee, Graupel oder Hagel steht in komplizierter Wechselwirkung mit dem hydrothermodynamischen Feld der Wolke. Eine genaue Kenntnis der vielfältigen Mikroprozesse ist erforderlich, um ihre Bedeutung für die Wolkenentwicklung zu verstehen und durch geeignete Parameter auszudrücken, die dann in einfacheren Wolkenmodellen verwendet werden können.

Für die Anregung und die Betreuung dieser Arbeit danke ich Herrn Prof. Dr. H. FORTAK und für die kritische Durchsicht auch Herrn Prof. Dr. K. HINKELMANN.

# LITERATURVERZEICHNIS

- [1] BOWEN, R.M.                      Diffusion in mixtures of elastic materials.  
WIESE, J. C.                      Int. J. Engng. Sci. 7 (1969) 689 - 722
- [2] DE GROOT, S.R.                    Non-equilibrium thermodynamics.  
MAZUR, P.                          Amsterdam 1962
- [3] DIEM, M.                            Zur Struktur der Niederschläge, III. Regen in  
der arktischen, gemäßigten und tropischen Zo-  
ne.  
Arch. Met. Geoph. Biokl. B 16 (1968) 347 - 390.
- [4] DUFOUR, L.                        Thermodynamics of clouds.  
DEFAY, R.                          Int. Geoph. Ser. 6 (1963) 1 - 255.
- [5] ECKART, C.                        The thermodynamics of irreversible processes,  
II. Fluid mixtures.  
Phys. Rev. 58 (1940) 269 - 275.
- [6] ERINGEN, A. C.                    A continuum theory of chemically reacting  
media.  
Int. J. Engng. Sci. 3 (1965) 197 - 212.
- [7] FINDEISEN, W.                    Physik der Wolken, I. Mikrophysik der Wolken.  
Berlin 1939
- [8] FORTAK, H.                        Über einige mathematisch-physikalische Grund-  
lagen der Theorie der allgemeinen atmosphä-  
rischen Zirkulation.  
Inst. Theor. Met., Berlin 1968.
- [9] FUCHS, N. A.                      The mechanics of aerosols.  
Oxford 1964
- [10] GUNN, R.                          The terminal velocity of fall for water droplets  
KINZER, G. D.                      in stagnant air.  
J. Met. 6 (1949) 243 - 248
- [11] HOWELL, W. E.                    The growth of cloud drops in uniformly cooled  
air.  
J. Met. 6 (1949) 134 - 148
- [12] JAUMANN, G.                    Geschlossenes System physikalischer und che-  
mischer Differentialgesetze.  
Akad. Wiss. Wien 120 (1811) 385 - 530
- [13] JUNGE, C                        Atmospheric chemistry.  
Adv. Geophys. 4 (1958) 1 - 108
- [14] KESSLER, E.                      On the distribution and continuity of water sub-  
stance in atmospheric circulations.  
Met. Monogr. 10 (1969) 1 - 84

- [15] KOENIG, L. R. Numerical test of the validity of the drop-freezing/splintering hypothesis of cloud glaciation.  
J. Atm. Sci. 23 (1969) 726 - 740
- [16] KOMABAYASI, M.  
GONDA, T.  
ISONO, K. Life time of water drops before breaking and size distribution of fragment droplets  
J. Met. Soc. Japan 42 (1964) 330 - 340
- [17] KOVETZ, A.  
OLUND, B. The effect of coalescence and condensation on rain formation in a cloud of finite vertical extend.  
J. Atm. Sci. 26 (1969) 1060 - 1065
- [18] LOHR, E. Entropieprinzip und geschlossenes Gleichungssystem.  
Denkschr. Akad. Wiss. Wien 93 (1917) 339 - 421
- [19] MEIXNER, J. Zur Thermodynamik der Thermodiffusion.  
Ann. Phys. 39 (1941) 333 - 356
- [20] MÜLLER, H. Zur allgemeinen Theorie der raschen Koagulation.  
Kolloid Beih. 27 (1928) 223 - 250
- [21] SAFFMAN, P. G.  
TURNER, J. S. On the collision of drops in turbulent clouds  
J. Fluid. Mech. 1 (1956) 16 - 30
- [22] SCHMAUSS, A.  
WIGAND, A. Die Atmosphäre als Kolloid.  
Braunschweig 1929
- [23] SCHNAIDT, F. Über die adiabatischen Zustandsänderungen feuchter Luft, die abgeleiteten Temperaturen und den Energievorrat atmosphärischer Schichtungen.  
Habilitationsschrift, München 1943.
- [24] SMOLUCHOWSKI, M. v. Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Molekularbewegung und Koagulation von Kolloidteilchen.  
Phys. Zeitschr. 17 (1916) 557 - 599
- [25] SYONO, S.  
TAKEDA, T. On the evaporation of raindrops in a subcloud layer.  
J. Met. Soc. Japan 40 (1962) 245 - 264
- [26] TRUESDELL, C. Sulle basi della termomeccanica  
Rend. Accad. Lincei 22 (1957) 33 - 88, 158 - 166
- [27] WEGENER, A. Thermodynamik der Atmosphäre  
Leipzig 1911



## LEBENS LAUF

Ich wurde am 22. 10. 1940 als Sohn des Fernmeldeingenieurs Alfred Pankrath und seiner Frau Irmgard, geborene Zickerick in Zepernick, Kreis Niederbarnim ( Brandenburg ) geboren. Von 1947 bis 1951 besuchte ich die Volksschule in Herford, von 1951 bis 1956 die Oberrealschule in Bamberg und von 1956 bis 1960 die Oberrealschule in Bayreuth, wo ich am 13. 7. 1960 die Reifeprüfung ablegte. Nach Ableistung der Wehrdienstpflicht in der Laufbahn des Reserveoffiziers entschied ich mich im Sommersemester 1962 für das Meteorologiestudium an der Freien Universität Berlin. Am 20. 7. 1964 bestand ich die Diplomvorprüfung und studierte danach zwei Semester Meteorologie an der Universität Hamburg. Im Wintersemester 1965/66 setzte ich das Studium wieder an der Freien Universität fort und legte am 10. 5. 1968 die Diplomprüfung in Meteorologie ab.

Seit dem 1. 10. 1968 arbeite ich als wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Theoretische Meteorologie unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. H. FORTAK an einem von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Forschungsvorhaben.





